

# Streifende Streuung schneller Atome an Oberflächen von Metalloxid-Kristallen und ultradünnen Filmen

## DISSERTATION

zur Erlangung des akademischen Grades  
doctor rerum naturalium  
(Dr. rer. nat.)  
im Fach Physik

eingereicht an der  
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen  
Fakultät I  
Humboldt-Universität zu Berlin

von  
Herr Dipl.-Phys. David Blauth  
geboren am 18. April 1976 in Weißwasser / O.L.

Präsident der Humboldt-Universität zu Berlin:  
Prof. Dr. Dr. h.c. Christoph Marksches

Dekan der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen  
Fakultät I:  
Prof. Dr. Lutz-Helmut Schön

Gutachter:

1. Prof. Dr. Helmut Winter
2. Prof. Dr. Friedrich Aumayr
3. Dr. Niklas Nilius

Tag der mündlichen Prüfung: 11.03.2010



## **Zusammenfassung**

Im Rahmen dieser Dissertation wurden Experimente zur Wechselwirkung von schnellen Atomen mit Oberflächen von Oxidkristallen, Metallkristallen und ultradünnen Oxidfilmen auf Metalloberflächen durchgeführt und modellhaft beschreiben. Die Experimente wurden im Regime der streifenden Streuung für Energien im keV-Bereich durchgeführt. Diese Streugeometrie bietet den Vorteil einer außerordentlich hohen Oberflächensensitivität und somit die Möglichkeit, die kristallographischen Eigenschaften der obersten Atomlage zu untersuchen. Darüber hinaus wurden Experimente zur Bestimmung des Energieverlustes der an den verschiedenen Oberflächen gestreuten Projektile und zur, durch diese Projektile induzierten, Elektronenemission durchgeführt. Die Anregungsenergie für die Elektronenemission und Exzitonen wurde an der Alumina/NiAl(110)- und der SiO<sub>2</sub>/Mo(112)- Oberfläche für die Streuung von He bestimmt. Durch die Bestimmung der Anzahl von emittierten Elektronen in Abhängigkeit des azimutalen Winkels konnten die Strukturen von obersten Lagen von Adsorbaten mit der Methode der Ionenstrahltriangulation bestimmt werden.

## **Abstract**

In the framework of the present dissertation the interactions of fast atoms with surfaces of bulk oxides, metals and thin films on metals were studied. The experiments were performed in the regime of grazing incidence of atoms with energies of some keV. The advantage of this scattering geometry is the high surface sensibility and thus the possibility to determine the crystallographic and electronic characteristics of the topmost surface layer. In addition to these experiments, the energy loss and the electron emission induced by scattered projectiles was investigated. The energy for electron emission and exciton excitation on Alumina/NiAl(110) and SiO<sub>2</sub>/Mo(112) are determined. By detection of the number of projectile induced emitted electrons as function of azimuthal angle for the rotation of the target surface, the geometrical structure of atoms forming the topmost layer of different adsorbate films on metal surfaces were determined via ion beam triangulation.



# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Experiment</b>	<b>7</b>
2.1	UHV Apparatur . . . . .	7
2.2	Heizung . . . . .	14
2.2.1	Boralectric Heizer . . . . .	14
2.2.2	Elektronenstoßheizung . . . . .	15
2.3	Oberflächenanalytik . . . . .	17
2.3.1	Messung von Streuverteilungen . . . . .	17
2.3.2	Ionenstrahltriangulation . . . . .	18
2.3.3	Auger-Elektronen-Spektroskopie . . . . .	23
2.3.4	Beugung langsamer Elektronen . . . . .	25
<b>3</b>	<b>Untersuchungen an MgO(001) und Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001)</b>	<b>27</b>
3.1	Kristallpräparation . . . . .	27
3.2	Elektronenemission an Al <sub>2</sub> O <sub>3</sub> (0001) . . . . .	32
3.3	Studien zum lagenweisen Wachstum von Vanadiumoxid auf Magnesiumoxid . . . . .	35
3.4	Beugung von schnellen Atomen an MgO(001) . . . . .	38
3.5	Streuung von schnellen Neonatomen an MgO(001) . . . . .	43
<b>4</b>	<b>Untersuchungen an Mo(112) und ultradünnen Filmen auf Mo(112)</b>	<b>53</b>
4.1	Kristallpräparation . . . . .	53
4.1.1	Präparation des sauberen Mo(112) . . . . .	54
4.1.2	Präparation der Sauerstoff-Überstrukturen auf Mo(112) und von SiO/Mo(112) . . . . .	55
4.2	Strukturuntersuchungen mittels azimuthal aufgelöster Elektro- nenemission . . . . .	59
4.2.1	Strukturuntersuchungen an p(1x2)O/Mo(112) mittels Ionenstrahltriangulation . . . . .	68

4.2.2	Strukturuntersuchungen an $p(2 \times 3)\text{O}/\text{Mo}(112)$ mittels Ionenstrahltriangulation . . . . .	72
4.3	Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission	76
4.3.1	Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission am sauberen $\text{Mo}(112)$ . . . . .	76
4.3.2	Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission am der mit Sauerstoff bedeckten $\text{Mo}(112)$ -Oberfläche . . . . .	81
4.3.3	Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission am mit $\text{SiO}$ bedeckten $\text{Mo}(112)$ . . . . .	86
<b>5</b>	<b>Untersuchungen an <math>\text{NiAl}(110)</math> und <math>\text{Al}_2\text{O}_3(0001)</math> / <math>\text{NiAl}(110)</math></b>	<b>93</b>
5.1	Kristallpräparation . . . . .	94
5.1.1	$\text{NiAl}(110)$ . . . . .	94
5.1.2	Alumina auf $\text{NiAl}(110)$ . . . . .	95
5.2	Ionenstrahltriangulation . . . . .	98
5.3	Schwelle der Elektronenemission für die Streuung von $\text{He}^0$ an $\text{NiAl}(110)$ . . . . .	104
5.4	Energieverlust und Elektronenemission für die Streuung von $\text{He}^0$ an $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ / $\text{NiAl}(110)$ . . . . .	111
5.5	Abhängigkeit von Energieverlust und Elektronenemission von der Sauerstoffbedeckung der Oberfläche . . . . .	122
<b>6</b>	<b>Zusammenfassung</b>	<b>131</b>
	<b>Danksagung</b>	<b>135</b>
	<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>137</b>
	<b>Abbildungsverzeichnis</b>	<b>155</b>
	<b>Selbständigkeitserklärung</b>	<b>159</b>

# Kapitel 1

## Einleitung

In der Arbeitsgruppe „Physik der Grenzflächen und dünnen Schichten“ des Instituts für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin wird die Physik von Oberflächen kristalliner Festkörper mit Methoden der streifenden Streuung von Ionen und Atomen untersucht[122]. Im Rahmen dieser Dissertation werden Experimente zur streifenden Streuung schneller Atome (Energien im keV - Bereich) an Oberflächen von Oxidkristallen, Metallkristallen und ultradünnen Oxidfilmen auf Metalloberflächen vorgestellt. Dabei wird auf der langjährigen Erfahrung der Arbeitsgruppe auf dem Gebiet der Wechselwirkung schneller Atome mit Festkörperoberflächen aufgebaut und es werden bestehende Methoden erweitert [8, 10, 56, 62, 64, 76, 105].

In vielen technologisch interessanten Anwendungen spielen Oxide eine entscheidende Rolle. Oxide haben katalytisch interessante Eigenschaften, so ist z.B. das in dieser Arbeit behandelte MgO bezüglich der Wasserstoff-Deuterium-Austauschreaktion[126] und der Dehydrierung von Methanol aktiv [127]. Das ebenfalls analysierte Alumina ist eine vielfältig eingesetzte Keramik mit einer Reihe nützlicher Eigenschaften. Beispielsweise wird es zur Härtung von Oberflächen, in der Katalyse, in Flachbildschirmen [66], in Metall-Oxid-Halbleiter-Feldeffekttransistoren (MOS-FET) [80], in Schreib-/Leseköpfen von Festplatten [81] und in DRAMs [47] verwendet.

Die Mehrzahl der heute technisch produzierten Chemikalien werden durch Reaktionen an Festkörperoberflächen (heterogene Katalyse) hergestellt [30, 38, 72]. Eine mikroskopische Beschreibung dieser industriellen Prozesse ist aufgrund der Komplexität der Katalysatoroberflächen und der stattfindenden Prozesse nicht möglich. In Modellsystemen werden deshalb einzelne Reaktionsschritte unter definierten Bedingungen untersucht. Hierbei müssen die im Labor verwendeten Katalysatoren bezüglich ihrer kristallographischen und elektronischen Eigenschaften umfassend charakterisiert werden. Mit der Methode der streifenden Streuung von schnellen Atomen ist es möglich, diese

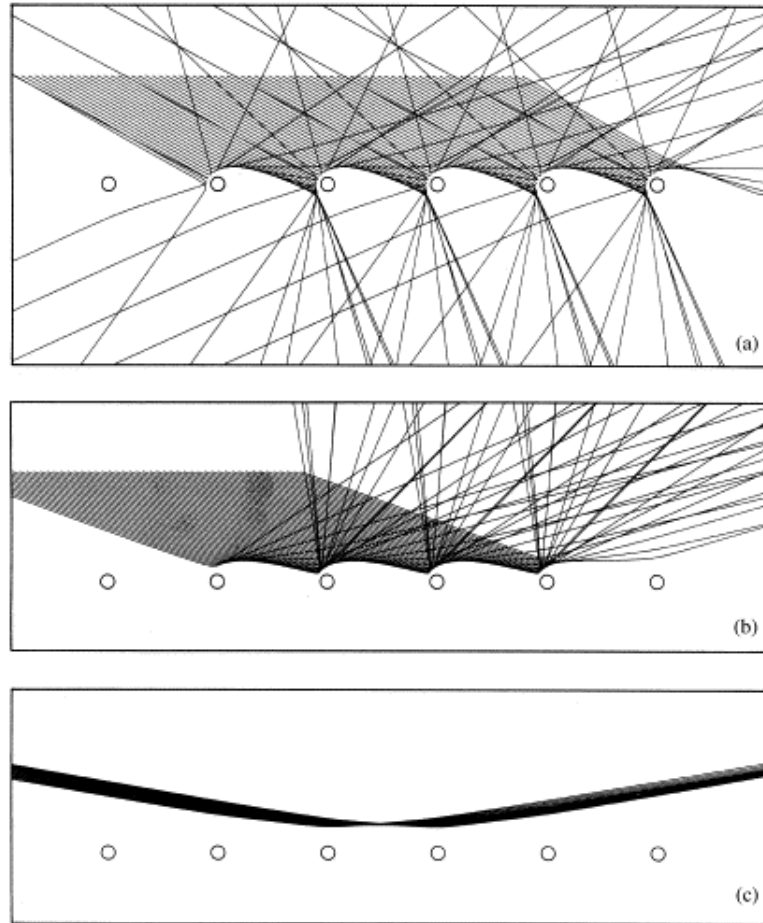


Abb. 1.1: Schematische Darstellung der Trajektorien bei der Streuung an einer Oberfläche, Trajektorien für die Streuung von 1 keV Ar Atomen an Al unter a) 30°, b) 20° und c) 10°, aus [122]

Strukturen der Kristalloberflächen aufzuklären. Zusätzlich kann die Position von Adsorptionsplätzen bezüglich der Substratatome von auf der Oberfläche adsorbierten Atomen oder Molekülen zu bestimmt werden.

Eine weitere wichtige Anwendung ist die Verwendung der Oxide als Trägermaterial für Übergangsmetall-Katalysatoren. Die Charakterisierung der Zusammensetzung und Struktur der Oxide als Substrat ist von großer Bedeutung für das Verständnis der Wirkungsweise der katalytisch aktiven Schichten in realen Anwendungen [35–37].

Im Regime der streifenden Streuung werden schnelle Projektile unter flachen Winkeln ( $\phi_{in} < 5^\circ$ ) an einer Oberfläche gestreut. Insbesondere gilt, daß der Einfallswinkel kleiner als der kritische Winkel sein muß:  $\phi_{in} < \phi_{krit}$ , bei welchem das Projektil in die Oberfläche eindringt.

In diesem Regime der Oberflächengitterführung (Channeling) sind die Komponenten der Bewegung parallel und senkrecht zur Oberfläche weitgehend entkoppelt. Die Bewegung parallel zur Oberfläche vollzieht sich mit der Parallelenergie

$$E_{\parallel} = E_0 \cos^2(\phi_{in}), \quad (1.1)$$

während die Energie der Bewegung senkrecht zur Oberfläche

$$E_{\perp} = E_0 \sin^2(\phi_{in}) \quad (1.2)$$

beträgt [33, 92]. Die Senkrechtkomponente  $E_{\perp}$  ist um etwa vier Größenordnungen kleiner als die Parallelkomponente  $E_{\parallel}$  und damit im eV-Bereich. Deshalb ist es möglich Streuexperimente durchzuführen, ohne in den Festkörper einzudringen.

In Abb. 1.1 ist schematisch der Trajektorienverlauf bei der Streuung an einer Oberfläche skizziert. Bei steilem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 30^\circ$  (a) werden die Projektile am stark korrigierten Potential einzelner Atome gestreut, daraus resultieren eine breite Streuwinkelverteilung und das Eindringen von Projektilen in die Oberfläche. Bei mittlerem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 20^\circ$  (b) und streifen der Streuung  $\phi_{in} = 10^\circ$  (c) werden die Projektile in einer Serie von Kleinwinkelstößen gestreut, es resultiert eine definierte, schmale Streuverteilung und das Eindringen in den Festkörper ist unterdrückt. Die streifende Streuung ist deshalb eine sehr oberflächensensitive Methode zur Untersuchung der Wechselwirkungen zwischen Projektil und Oberfläche. Das Oberflächenpotential läßt sich als eine Mittelung der Potentiale der Atome in der Oberfläche beschreiben. Bei der Streuung entlang hochindizierter Richtungen ergibt sich effektiv ein planares Potential, welches durch den Abstand  $z$  zur Oberfläche bestimmt wird (planares Channeling) [29]. Entlang niedrig indizierter Richtungen werden die Projektile an den Ketten der Oberflächenatome geführt (axiales Channeling). Das Potential ist in diesem Fall vom Abstand des Projektils zur Atomkette abhängig und zeigt keine planare Symmetrie.

Diese unterschiedlichen Regime macht sich die Ionenstrahltriangulation zu Nutze. Die Ionenstrahltriangulation ist eine Messmethode zur Bestimmung der azimuthalen Winkel zwischen verschiedenen dichtgepackten Atomketten und der zugehörigen Kanalbreite an langreichweitig geordneten Kristalloberflächen. Experimentell werden dafür unter flachen Einfallswinkeln ( $1^\circ$ - $2^\circ$ ) leichte Atome bei Primärenergien von einigen 10 keV über die Oberfläche gestreut. Bei azimuthaler Drehung in eine niedrig indizierte Richtung der Oberfläche tritt ein Übergang von planarer zu axialer Streusymmetrie auf. Dieser äußert sich in einer Änderung der Elektronenausbeute pro gestreutem Projektil. Die Darstellung der Elektronenausbeute als Funktion des

azimutalen Drehwinkels führt zu einer für die Oberfläche charakteristischen Ionenstrahltriangulationskurve.

In weiteren Untersuchungen werden im Regime des axialen Channelings von Atomen Streuverteilungen analysiert und mit Ergebnissen aus Trajektorienimulationen verglichen. Aus diesen Experimenten lassen sich wertvolle Informationen über das Potential und die Geometrie der Oberfläche gewinnen. Die charakteristischen Intensitätsüberhöhungen (Regenbogenwinkel) innerhalb von Streuverteilungen für flache Einfallswinkel sind spezifisch für die untersuchte Struktur und für eine vorgegebene Oberfläche sehr sensitiv auf die Energie, sowie im Bereich klassischer Streuung auch auf den Einfallswinkel der verwendeten Projektile. Da zusätzlich eine starke Abhängigkeit von der Art der verwendeten Projektile existiert, wurden für die Untersuchungen unterschiedliche Edelgase genutzt. Bei niedrigen Projektilenergien werden Beugungsstrukturen in den Streuverteilungen beobachtet. Die de-Broglie-Wellenlänge eines als Materiewelle beschriebenen Projektils ist von der gleichen Größenordnung wie typische atomare Abstände in Festkörpern. Mithilfe der Beugung schneller Atome an Festkörperoberflächen können interferometrische Informationen über das Wechselwirkungspotential gewonnen werden.

Neben diesen Methoden zur Charakterisierung der Oberflächen liefern Untersuchungen zur Elektronenemission der gestreuten Projektile und zur Elektronenausbeute ergänzende Informationen zur Wechselwirkung zwischen Projektil und Oberfläche. Der Energieverlust von an den Oberflächen gestreuten Projektilen wird koinzident mit den während des Streuprozesses emittierten Elektronen gemessen. Weil dabei auch Ereignisse ohne Elektronenemission erfasst werden, ist es mit dem verwendeten Aufbau möglich auch sehr kleine Elektronenausbeuten zu bestimmen. Diese Tatsache ist für den Vergleich der Streuprozesse an Metall und Oxidoberflächen sehr wichtig. Neben dem grundlegenden Verständnis physikalischer Zusammenhänge sind der Energieverlust und die Elektronenemission von praktischer Bedeutung z.B. für Teilchen-Detektoren, Oberflächen-Analysen und das Plasma-Ätzen.

Im Anschluss an dieses einleitende Kapitel wird in Kapitel 2 der experimentelle Aufbau beschrieben und die Messmethoden im Detail vorgestellt. Im 3. Kapitel werden Untersuchungen zur Elektronenemission an  $\text{MgO}(001)$  und  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  vorgestellt. Im Anschluss werden Experimente zur Regenbogenstreuung und zur Beugung schneller Atome an  $\text{MgO}(001)$  präsentiert. In Kapitel 4 und 5 werden Experimente an den Substraten  $\text{NiAl}(110)$  bzw.  $\text{Mo}(112)$  beschreiben und auf an diesen Oberflächen aufgebrachte ultradünne Filme eingegangen. Wie die Vergleiche mit den Experimenten an den Substraten zeigen, verändern diese ultradünnen Filme die physikalischen Ei-

enschaften der Oberflächen sehr stark. In Kapitel 6 werden die Ergebnisse der Dissertation zusammengefasst.

In dieser Arbeit werden, falls nicht anders angegeben, atomare Einheiten (atomic units, a.u.) verwendet. Diese sind durch  $\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1$  (reduziertes Plancksches Wirkungsquantum),  $m_e = 1$  (Masse des Elektrons) und  $4\pi\epsilon_0 = 1$  ( $\epsilon_0$ : Dielektrizitätskonstante) definiert. Einige nützliche Umrechnungsfaktoren sind in der folgenden Tabelle zusammengestellt:

Größe	Umrechnungsfaktor
Länge (Bohrscher Radius)	1 a.u. = $0,52918 \times 10^{-10}$ m
Geschwindigkeit (1. Bohrsche Geschwindigkeit)	1 a.u. = $2,1877 \times 10^6$ m/s
Masse (Masse des Elektrons)	1 a.u. = $9,1094 \times 10^{-31}$ kg
Ladung (Elementarladung)	1 a.u. = $1,6022 \times 10^{-19}$ C
Energie (Hartree-Energie)	1 a.u. = 27,211 eV
Zeit	1 a.u. = $2,4189 \times 10^{-17}$ s
elektrische Feldstärke	1 a.u. = $5,1422 \times 10^6$ kV/cm





# Kapitel 2

## Experiment

In diesem Kapitel werden die durchgeführten Experimente und der dafür verwendete experimentelle Aufbau beschrieben. Auf speziell adaptierte Geräte und Methoden wird näher eingegangen, für etablierte Techniken wird auf die entsprechende Literatur verwiesen [49].

### 2.1 UHV Apparatur

Der Arbeitsgruppe „Physik der Grenzflächen und dünnen Schichten“ des Instituts für Physik der Humboldt-Universität zu Berlin steht ein 400 kV-Ionenbeschleuniger zur Verfügung [69, 70]. Die mit diesem Beschleuniger erzeugten Ionen werden mit einem Magneten nach Massen separiert. Mit einem weiteren Magneten werden die Ionen in die Strahlrohre der Streukammern gelenkt.

Da der 400 kV-Ionenbeschleuniger aufgrund seiner ionenoptischen Eigenschaften nur Ionen mit mehr als  $E=30$  keV Projektilenergie mit ausreichender Strahlintensität und Energieschärfe erzeugen kann, wird als Quelle für einfach geladene Ionen mit Energien bis  $E=30$  keV ein zusätzlicher Kleinbeschleuniger verwendet. Dort werden die Ionen in einer Heißkathodengasentladungsquelle SO55 der Firma „High Voltage“ erzeugt. Die beschleunigten Ionen werden unmittelbar nach der Quelle mittels eines Magneten massensepariert in die Streukammer gelenkt. Der Eintritt in die Kammer erfolgt durch ein Blendenpaar welches aus einer vertikalen und einer horizontalen Blende (jeweils 0,25 mm Spaltbreite) besteht. Durch die Benutzung weiterer Blendenpaare beträgt die Divergenz des Strahles am Ort des Targets  $0,02^\circ$ . Mit diesem Kleinbeschleuniger und einer geeigneten Wahl der Blenden können Energieschärfen von  $\Delta E/E < 10^{-3}$  erreicht werden.

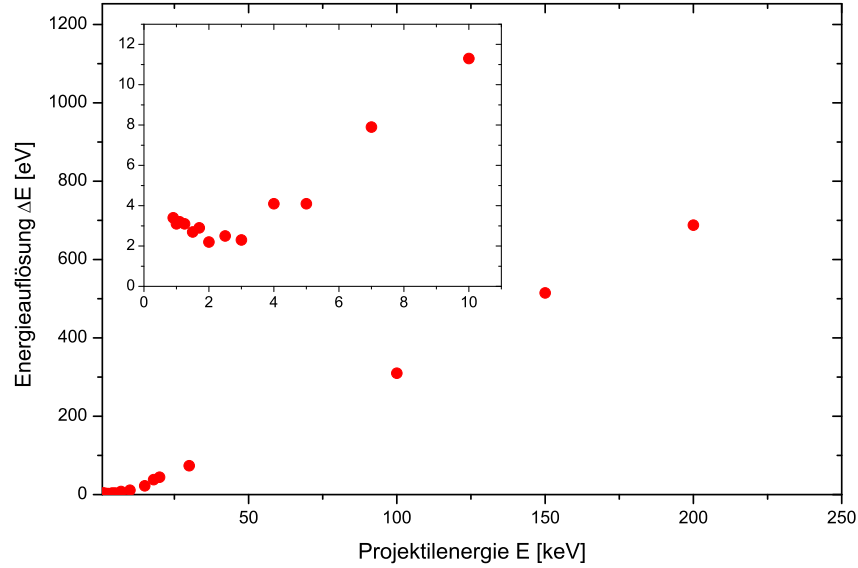


Abb. 2.1: Experimentelle relative Energieschärfe  $\Delta E/E$  als Funktion der Primärenergie  $E$

In Abb. 2.1 sind die mit diesem Aufbau erreichten Energieschärfen eines neutralen Heliumstrahls in Abhängigkeit von der Strahlenergie aufgetragen. Für Energien kleiner als 3 keV wird die Energieauflösung durch die Energieschärfe der SO55 - Quelle bestimmt. Erst der leichte Anstieg von  $\Delta E/E < 10^{-3}$  ab 3 keV wird durch die Energieauflösung des Systems vorgegeben.

In Abb. 2.2 ist der Aufbau der Meßapparatur skizziert. Der Kernpunkt des verwendeten experimentellen Aufbaus ist die koinzidente Messung von Flugzeitspektren an der Oberfläche gestreuter Projektilen zeitgleich mit dem entsprechenden Elektronenzahlspektrum für jedes einzelne Streueignis. Weil für neutrale Projektilen der Nachweis in einem Energieanalysator nicht möglich ist, wird die Messung des Energieverlusts über eine Flugzeitmessung der Projektilen realisiert. Dazu wird der Ionenstrahl in einem Plattenpaar durch Anlegen einer rechteckförmigen Spannung mit 50 kHz gepulst. Dabei wird der gepulste Strahl aus der Achse des ursprünglichen Strahls gehoben, so dass der gepulste Strahl und der Strahl der neutralen Projektilen geometrisch gegeneinander versetzt sind. Aufgrund dieser Versetzung können die ungepulsten neutralen Projektilen mit einer Blende ausselektiert werden. Die beste Auflösung wird bei Flankenspannungen für die Pulsung von  $\pm 5V$  pro 1 keV Projektilenergie erreicht.

Die Ionen werden nachfolgend in einem Gastarget quasiresonant neutralisiert. Dies bedeutet, dass der  $H^+$ -Strahl in Stößen mit Kryptonatomen und

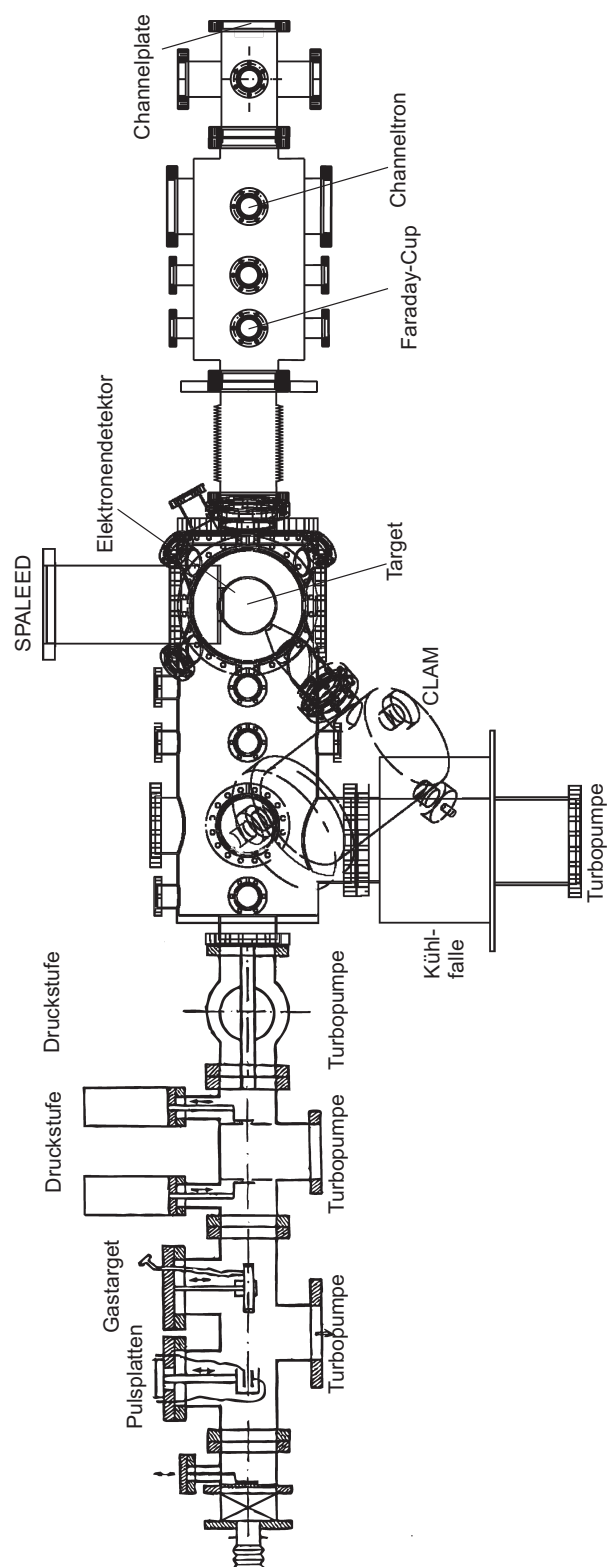


Abb. 2.2: Skizze der UHV-Apparatur [1]

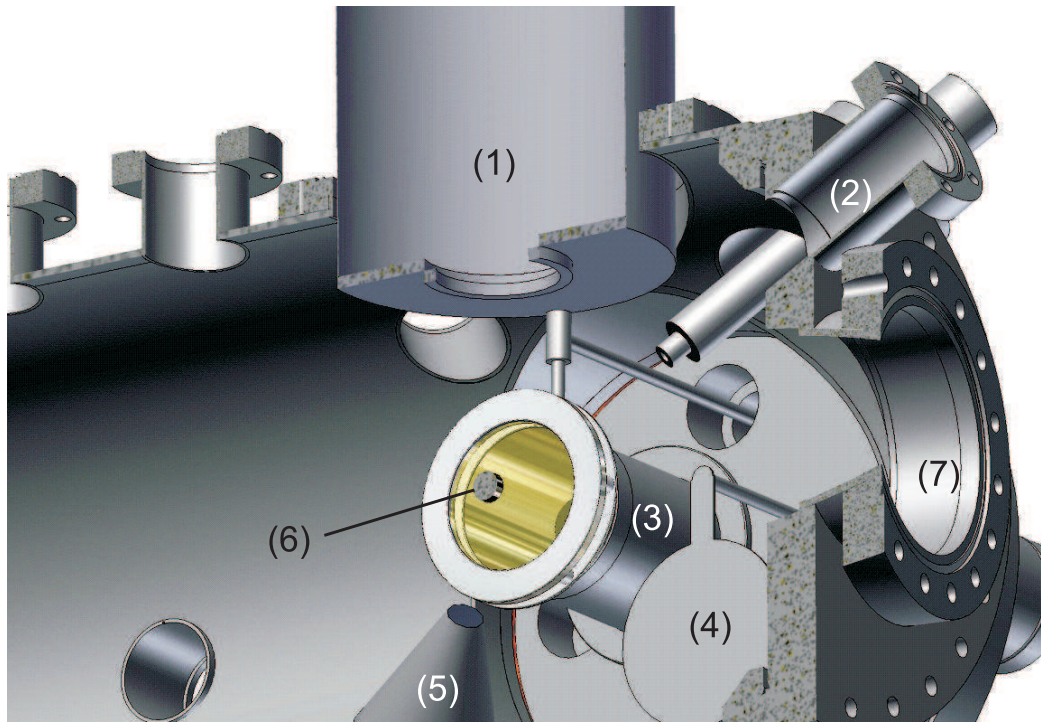


Abb. 2.3: Schnitt durch die UHV-Apparatur im Bereich des Targets, (1) - SPA-LEED, (2) - Elektronenkanone, (3) - Elektronendetektor, (4) - Abschattungsblech für den Elektronendetektor, (5) - CLAM 100, (6) - Target, (7) - Kammerflansch in Richtung CEM

die Heliumionen mit Heliumatomen neutralisiert werden. Diese Quasiresonanz ist für die Energieschärfe, aber auch für die Ausbeute an neutralen Projektilen, wichtig. Das Gastarget befindet sich in einem 90 mm langen Zylinder mit 19 mm Innendurchmesser, an dessen Enden jeweils ein 2x4 mm großer Schlitz eingebracht ist. Zur Neutralisation ist innerhalb des Gastargets ein Druck von etwa  $10^{-3}$  mbar notwendig. Um jedoch in der Streukammer einen für Experimente an sauberen Oberflächen erforderlichen Basisdruck von  $5 \cdot 10^{-11}$  mbar aufrecht zu erhalten, befindet sich nach dem Gastarget eine weitere differentielle Pumpstufe. Die Turbomolekularpumpen im Bereich des Gastargets und der differentiellen Pumpstufe haben eine Saugleistung von jeweils ca. 350 l/s. Nach dem Austritt aus dem Gastarget werden alle überlebenden geladenen Projektilen in einem weiteren Plattenpaar ausgelenkt.

Nach dem Passieren eines letzten Blendenpaares, das der Begrenzung der Strahldivergenz und zur Unterdrückung störender Teilchenströme dient, gelangen die Neutralteilchenpakete in die Streukammer, dort werden die Projektilen an der Probe gestreut. Das Target ist auf einem um  $360^\circ$  drehbaren

Targethalter fixiert. Um verschiedene Einfallswinkel einstellen zu können, kann der Targethalter zusätzlich zur Drehung gegen die Streuebene verkippt werden. Der Drehpunkt dieser Kippung befindet sich genau am Ort des Targets, eine Korrektur der Flugstrecke zur Energieverlustberechnung ist deshalb nicht nötig. Unter dem Target befindet sich eine Heizung, mit welcher das Target auf Temperaturen von bis zu 2000 °C geheizt werden kann (s. Kap. 2.2). Die Kontrolle der Temperatur wird mittels einem Pyrometer realisiert [53].

Die gestreuten Projektile werden in einem Abstand von 1,38 m hinter dem Target durch einen Channelplate Electron Multiplier (CEM) der Firma PHOTONIS nachgewiesen [85, 110]. Um die gestreuten Teilchen zu erfassen, wird der CEM mittels eines Faltenbalges in den gestreuten Strahl verschoben. Der Öffnungswinkel des Channelplates beträgt 0,8°. Im verwendeten Time-Of-Flight(ToF)-Aufbau dient das CEM-Signal als Startpuls für einen Time-To-Amplitude-Converter (TAC), wohingegen das Stoppsignal vom Pulsgeber kommt. Das Ausgangssignal des TAC wird in einem Analog-to-Digital-Converter (ADC2) digitalisiert und danach in einer Speichereinheit (BCI6-ACQ-1) abgelegt. Die verwendete Schaltung ist in Abb. 2.4 skizziert.

Die bei der Streuung entstehenden Elektronen werden mit Hilfe eines Elektronendetektors registriert (siehe Abb. 2.5). Dieser Detektor besteht im wesentlichen aus einem Oberflächen-Sperrschicht-Detektor (SBD) [18, 19], der sich auf einem Hochspannungspotential von 25 kV befindet <sup>1</sup>. Elektronen, die auf diesen Detektor treffen, generieren in der Sperrschicht Elektron-Loch-Paare, deren Anzahl proportional zur durch die kinetische Energie der Elektronen deponierten Energie ist. Die durch ein einzelnes Ion induzierte Emission eines Elektrons dauert ca.  $10^{-11}$  s. Diese Zeit ist kürzer als die Zeitauflösung von ca.  $10^{-9}$  s des Detektors. Deshalb wird ein Ereignis, bei dem n Elektronen ausgelöst werden, als ein Ereignis mit der n-fachen Energie von 25 keV registriert [65].

Um alle bei der Streuung der Projektile am Target entstehenden Elektronen zu erfassen, befindet sich ca. 1 cm vor dem Target ein hochtransparentes Gitter, an dem eine Spannung von + 100 V angelegt wird (Skizze s. Abb. 2.3). Mit Hilfe dieser Spannung werden die Elektronen aus dem Halbraum vor dem Target abgesaugt und auf den Oberflächen-Sperrschicht-Detektor fokussiert.

Die Adresse zur Speicherung gibt die Pulshöhe des SBD an, die in einem zweiten ADC (ADC1) digitalisiert wurde. Durch einen Quarz-Timer wird die Speichereinheit (BCI6-ACQ-1) permanent getriggert. Ein Signal wird nur dann abgespeichert, wenn zu einem Triggerpuls ein Projektil am CEM nach-

---

<sup>1</sup>Leihgabe der TU-Wien, Prof.F.Aumayr, Institut für Allgemeine Physik

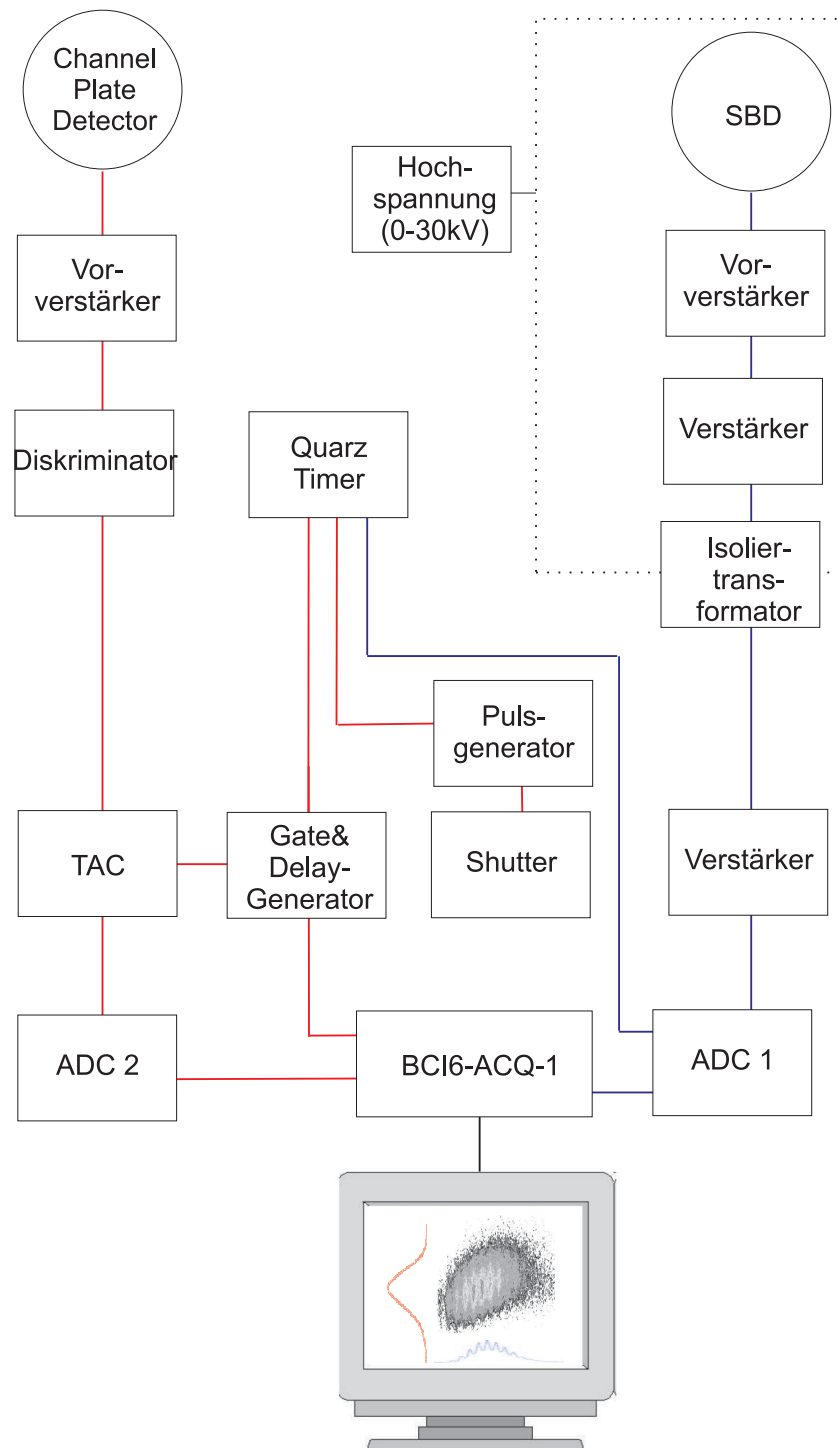


Abb. 2.4: Skizze der Schaltung für die Koinzidenzmessung

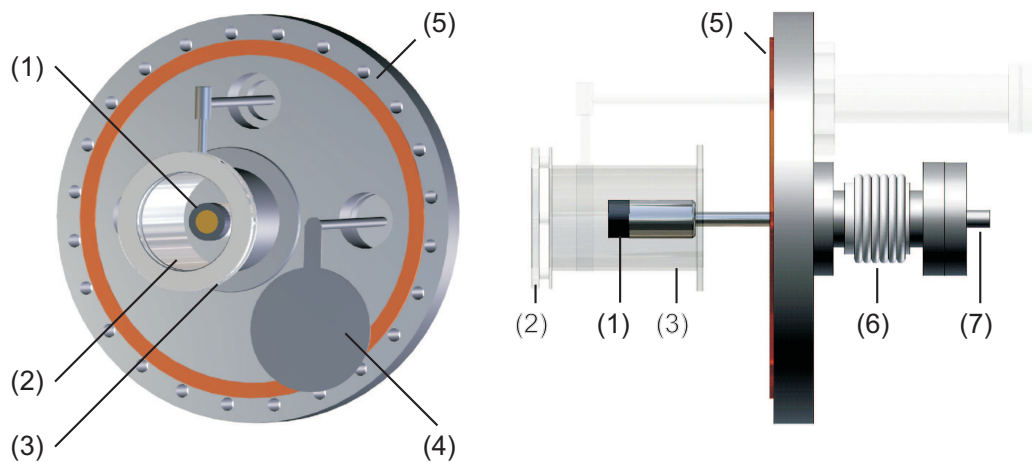


Abb. 2.5: Aufbau des Elektronendetektors, (1) - SB-Detektor [18, 19] auf 25 kV Hochspannungspotential, (2) - auf +100 V vorspannbares hochtransparentes Netz, (3) - Zylinder, (4) - Abschattungsblech, (5) - CF200-Flansch, (6) - Isolator, (7) - Anschluß für Vorverstärker (BNC)

gewiesen wird, unabhängig vom Elektronensignal. Damit wird die Aufzeichnung von Ereignissen ohne Elektronenemission ermöglicht und es ist möglich, sehr kleine Elektronenausbeuten zu bestimmen. Aus Trajektorien Simulationen mit dem Computerprogramm „SIMION“ und experimentellen Tests ist bekannt, dass 98% der Elektronen mit Energien unter 50 eV, die sich im Halbraum vor dem Target befinden, durch einen so aufgebauten Elektronendetektor nachgewiesen werden [65]. Aufgrund dieser hohen Detektoreffizienz sind Korrekturen an Elektronenzahlspektren klein und können in der Regel vernachlässigt werden.

Das hier angewandte ToF-Konzept setzt voraus, dass pro Zeitfenster jeweils nur ein Projektil im Paket vorhanden ist. Wenn das nicht der Fall ist, sich also z.B. zwei Projektile in einem Paket befinden, dann werden die koinzident zu diesen beiden Projektilen ausgelösten Elektronen trotzdem nur einem Streuereignis zugeordnet. Das bedeutet, dass die Elektronenausbeute pro Streuereignis in diesem Fall nicht korrekt ermittelt wird. Um solche Effekte zu studieren, wurden Experimente durchgeführt, bei denen die Intensität des primären Strahls (und somit die Wahrscheinlichkeit für die Existenz von mehr als einem Projektil pro Paket) oder die Elektronenausbeute pro Projektil (durch Veränderung von Einfallswinkel bzw. Primärenergie) variiert wird.

## 2.2 Heizung

Während der Präparation der verschiedenen Kristalle werden in der UHV-Kammer den unterschiedlichen Anforderungen entsprechende Heizer verwendet. Die Präparationszyklen umfassen das abwechselnde Sputtern und Ausheilen der Kristalle. Die durch das Sputtern entstandenen Oberflächendefekte müssen durch Heizen des Targets auf eine geeignete Temperatur ausgeheilt werden. Die Ausheiltemperatur ist stark materialabhängig. Als Richtwert kann die Oberflächenschmelztempertur gelten. Für Aluminium-, Kupfer-, Silber-, Goldoberflächen genügt eine einfache Widerstandsheizung: ein dünner Draht wird in einigen Schlaufen hinter dem Target angebracht. Ein Strom von einigen Ampere läßt den Draht glühen. Der Kristall kann mit einem solchen Aufbau auf bis zu  $800^{\circ}\text{C}$  geheizt werden. Ein Vorteil dieser Heizung ist ihr einfacher Aufbau und die einfache Bedienbarkeit.

### 2.2.1 Boralectric Heizer

Für Temperaturen bis etwa  $1200^{\circ}\text{C}$  wurde ein Boralectric Heizer [2] verwendet. In Abb. 2.6 ist der Aufbau skizziert. Der Heizer selbst ist eine Platte aus Bornitrid, in die eine Schleife aus Kohlenstoff eingelassen ist. Aus dem Inneren des Heizers werden diese Kohlenstoffbahnen an zwei Kontakten in gegenüberliegenden Ecken der Platte geführt. Diese Kontakte werden durch kleine Tantalbleche abgedeckt, weil sonst dort der Kohlenstoff offen liegt und während des Heizens in die Umgebung des Heizers verdampft wird. Zwei weitere Bohrungen sind für die Halterung des Kristalls und des Heizers vorgesehen. Der Betrieb des Heizers ist ähnlich einfach wie bei der Glühfadenheizung. Die Temperatur wird durch den Strom bestimmt, der durch den Heizer fließt.

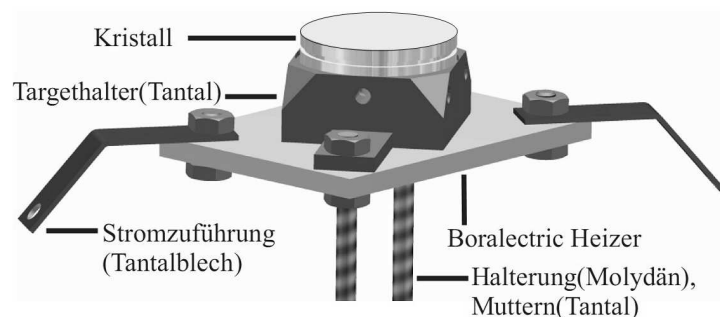


Abb. 2.6: Skizze des Boralectric Heizers[2]



Beim Aufbau ist darauf zu achten, dass über dem Heizer nicht mehr als 8 Ohm abfallen. Besonders nach den ersten Heizzyklen lockern sich die elektrischen Kontakte und der Widerstand steigt, das Heizen der Probe ist dann nicht mehr möglich. Durch mehrmaliges Anziehen der Muttern an den elektrischen Kontakten und zwischenzeitliches Erwärmen des Heizers ist ein zuverlässiger wartungsfreier Betrieb über viele Monate möglich.

### 2.2.2 Elektronenstoßheizung

Für die Präparation der Oxideinkristalle sind höhere Temperaturen nötig, als sie mit dem Boralelectric Heizer erreichbar sind. Um diese höheren Temperaturen erreichen zu können, wurde eine Elektronenstoßheizung gebaut. Bei dieser Art des Heizers werden Elektronen durch Anlegen einer hohen Spannung auf ein metallisches Target beschleunigt, dadurch erwärmt sich die von den Elektronen getroffene Fläche.

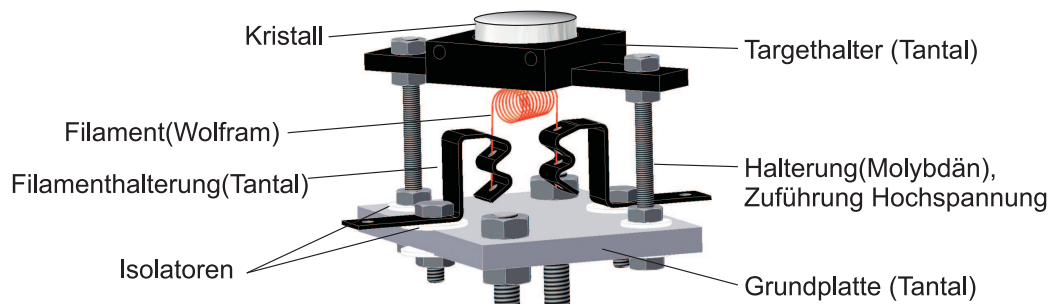


Abb. 2.7: Skizze des Elektronenstoßheizers

Der Aufbau eines für diese Arbeit gebauten Elektronenstoßheizers ist in Abb. 2.7 skizziert. Das Target wird mit einem Halter so auf eine Platte montiert, dass im Vakuum eine Spannung von bis zu 2000 V zwischen Targethalter und der Grundplatte angelegt werden kann. Auf der Grundplatte wird zusätzlich noch ein Filament als Elektronenquelle angebracht. Der Abstand zwischen Filament und der Unterseite des Targethalters beträgt etwa 2 mm. Als Filament kann statt eines kommerziellen Filaments auch ein 0,2 mm dicker Wolframdraht verwendet werden. Dieser wird, wie in Abb. 2.7 angedeutet, zu einer Wendel geformt, indem er z.B. um einen sehr dünnen Bohrer etwa 10 mal gewickelt wird. Der Targethalter wurde aus Tantal (Schmelztemperatur  $T_S = 3017\text{ °C}$ ) gefertigt, die Gewindestifte sind ebenfalls aus Tantal und die Muttern im oberen Bereich bestehen aus Molybdän ( $T_S = 2623\text{ °C}$ ). Die Erfahrung zeigt, dass sich eine solche Tantal/Molybdän-Verbindung auch

nach vielen Heizzyklen besser lösen läßt, als eine aus gleichen Materialien. Auch die dünnen Bleche, in die das Filament gesteckt ist, bestehen aus Tantal. Der Vorteil dieser Halterung des Filaments in lediglich drei Bohrungen pro Beinchen besteht nicht nur darin, das man es leicht wechseln kann. Es hat sich vielmehr als praktisch erwiesen, wenn man das Filament erst nach dem kompletten sonstigen Aufbau des Heizers exakt unter dem Target positionieren kann. Sowohl diese Position, als auch der Abstand zum Targethalter müssen möglichst genau sein.

Betrieben wird die Heizung, indem man zunächst das Filament zum Glühen bringt, typische Werte sind 3 A bei 10 V. Außerdem wird eine Hochspannung an den Targethalter angelegt. Sobald die Emission des Filaments ausreichend ist, fließt ein Strom. Mit 1000 V und 100 mA können mit diesem Aufbau 1600°C an der Targetoberfläche erzeugt werden.

Weil mit diesem Heizer Isolatoren (z.B.  $\text{Al}_2\text{O}_3$  ,  $\text{MgO}$  ) ausgeheilt werden sollen, darf der Targethalter keinen Ausschnitt unter dem Kristall haben, die Elektronen würden den Kristall aufladen und ihn nicht mehr erreichen. Für das Ausheilen von Metallen ist es möglich, durch einen solchen Ausschnitt die Rückseite des Metalltargets direkt zu erwärmen. Auf diese effizientere Methode wurde jedoch verzichtet, weil die Trägheit des Heizers, die sich daraus ergibt, dass zunächst der Halter und dann das Target erwärmt wird, ein großer Vorteil ist. Für die für diese Arbeit auszuheilenden Kristalle der oben beschriebene Aufbau die Anforderungen.

## 2.3 Oberflächenanalytik

### 2.3.1 Messung von Streuverteilungen

Eine entscheidende Voraussetzung um Experimente mit streifend an Kristalloberflächen gestreuten Atomen durchführen zu können sind atomar ebene Oberflächen. Deshalb sind Terrassenbreiten von mehreren 100 Å notwendig, damit die Experimente nicht durch binäre Stöße der Projektile an Stufenkanten oder Adatomen dominiert werden.

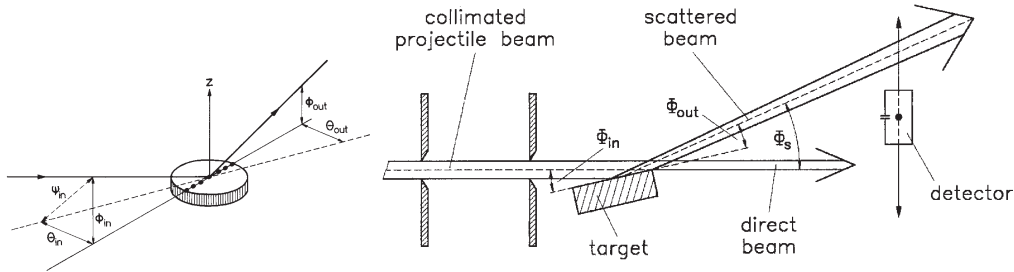


Abb. 2.8: Geometrie der streifenden Streuung, aus [122]

Neben Standardmethoden der Oberflächenanalytik wie Low Energy Electron Diffraction (LEED) und Auger-Elektronen-Spektroskopie (AES) wird die Qualität der Oberflächen durch die Aufnahme von winkelaufgelösten Streuverteilungen kontrolliert. Diese Methode zeichnet sich durch eine hohe Sensitivität auf Störstellen in der obersten Atomlage aus. Zur Aufnahme der Streuverteilungen werden neutrale Projektile streifend an der Oberfläche gestreut. Die Intensität der gestreuten Projektile wird dann als Funktion des Streuwinkels  $\phi_s$  dargestellt. Abb. 2.10 zeigt eine solche polare Winkelverteilung für die Streuung an Mo(112) vor und nach der Präparation. Für den idealen Fall, dass der Streuwinkel  $\phi_s$  gleich dem doppelten Einfallswinkel  $\phi_{in}$  ist, liegt planare Gitterführung vor. Die Projektile werden elastisch, in einer Serie von Kleinwinkelstößen, reflektiert (Bereich C in Abb. 2.9).

Die Breite der Winkelverteilung wird durch die Streuung an thermisch ausgelenkten Oberflächenatomen bestimmt. Weil der minimale Abstand der Projektile zur Kristalloberfläche unter den dargestellten Bedingungen etwa 0,5 Å und der Interlagenabstand 1,5 Å beträgt, haben Oberflächendefekte im Gitter einen großen Einfluss auf den Streuprozess. Wie Pfandzelter zeigt [83], führen Aufwärtsstufen in der Oberfläche zu erhöhter überspekularer Intensität (D, E in Abb. 2.9) und Abwärtsstufen zu unterspekularer Intensität (A, B).

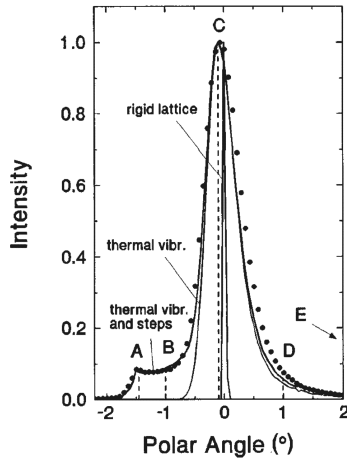


Abb. 2.9: Einfluss von thermischen Schwingungen und Oberflächen defekten auf die charakteristischen Strukturen polarer Winkelverteilungen, aus [83]

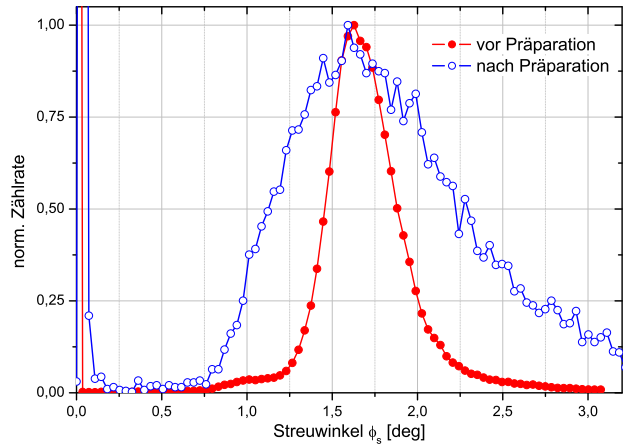


Abb. 2.10: Vergleich von polaren Winkelverteilungen für die Streuung von 25 keV H an Mo(112) vor und nach der Targetpräparation

Die blauen (offenen) Symbole zeigen eine Verteilung, die am noch unpräparierten Mo -Kristall aufgenommen wurde. Auch bei diesem Präparationszustand läuft der Streuprozess nicht völlig undefiniert ab. Die am präparierten Kristall aufgenommene polare Winkelverteilung zeigt fast keinen Fuß im unterspekularen Bereich und keinen Ausläufer für überspekuläre Projektile. Das sind Indizien für eine gute Qualität der Oberfläche mit Terrassenbreiten von mehr als 100 Å.

### 2.3.2 Ionenstrahltriangulation

Noch bevor in der Präparationsphase die Oberflächenqualität routinemäßig durch die Aufnahme von Streuverteilungen kontrolliert wird, können während des Sputterns Targetstromkurven, wie in Abb. 2.11 dargestellt, aufgenommen werden. Dabei wird ein Strom gemessen, der durch aus dem Target emittierte Elektronen dominiert wird. Dieser Strom wird in Abhängigkeit vom Azimut aufgezeichnet und spiegelt die Symmetrie der Oberfläche wider. Für Abb. 2.11 wurden 100 keV Ar<sup>+</sup> an NiAl(110) bei  $\phi_{in} = 1,52^\circ$  gestreut. Der Targetstrom betrug 2,5  $\mu$ A.

Die emittierten Elektronen können auch mit dem Elektronendetektor (s.

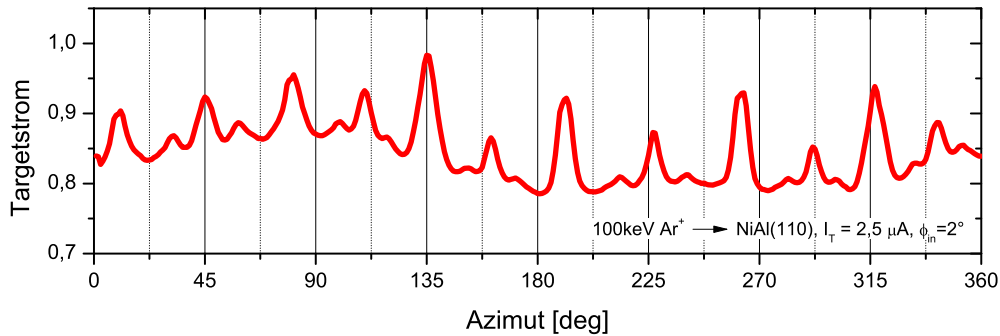


Abb. 2.11: Targetstromkurve, während des Sputterns aufgenommen

Abb. 2.5) detektiert werden. Zählraten von  $10^4$  Elektronen / s treten bei dieser Methode schon für Ionenströme von weniger als  $10^{-15}$  A auf. Damit verbunden sind sehr geringe Schädigungen der Oberflächen durch die Projektile. Targetstromkurven für die Streuung von 30 keV  $H^0$  bzw. 200 keV  $H^0$  an Al(110) sind in Abb. 2.12 dargestellt. Um solche Daten zu generieren, werden Elektronenzahlspektren als Funktion des azimuthalen Winkels aufgenommen [64]. Dies kann geschehen, indem zu jedem azimuthalen Winkelschritt ein Spektrum abgespeichert wird oder indem Bereiche des Spektrums mittels Diskriminatoren ausgewählt werden, und aus diesen die Zählrate als Funktion des azimuthalen Winkels mitgeschrieben wird. Die erste Methode hat den Vorteil, dass man die volle Information konserviert und das Setzen der „Diskriminatorschwellen“ per Software nach der Messung, also erst während der Auswertung erfolgt. Außerdem braucht die Elektronenausbeute der Elektronenemission nicht vor der Messung bekannt zu sein<sup>2</sup>. Abb. 2.13 zeigt zwei Elektronenzahlspektren, die bei der Streuung von 30 keV  $H^0$  an Al(110) aufgenommen wurden. Die einzelnen Elektronenanzahlen sind gut voneinander zu unterscheiden und wurden deshalb auf der Abszisse den Impulshöhen zugeordnet.

Das Spektrum für die [01]-Richtung (rot in Abb. 2.13) unterscheidet sich stark von dem für eine hochindizierte Kristallrichtung (blau). Bei der Streuung entlang der niedrigindizierten Richtung werden pro Projektil mehr Elektronen emittiert als bei der Streuung entlang einer random-Richtung. Für die in Abb. 2.12 dargestellte Kurve wurde das Integral unterhalb der Spektren innerhalb des grün hinterlegten Bereichs als Funktion des Azimuts darge-

<sup>2</sup>die Elektronenausbeute ist die mittlere Anzahl an Elektronen, die pro gestreutem Projektil ausgelöst werden

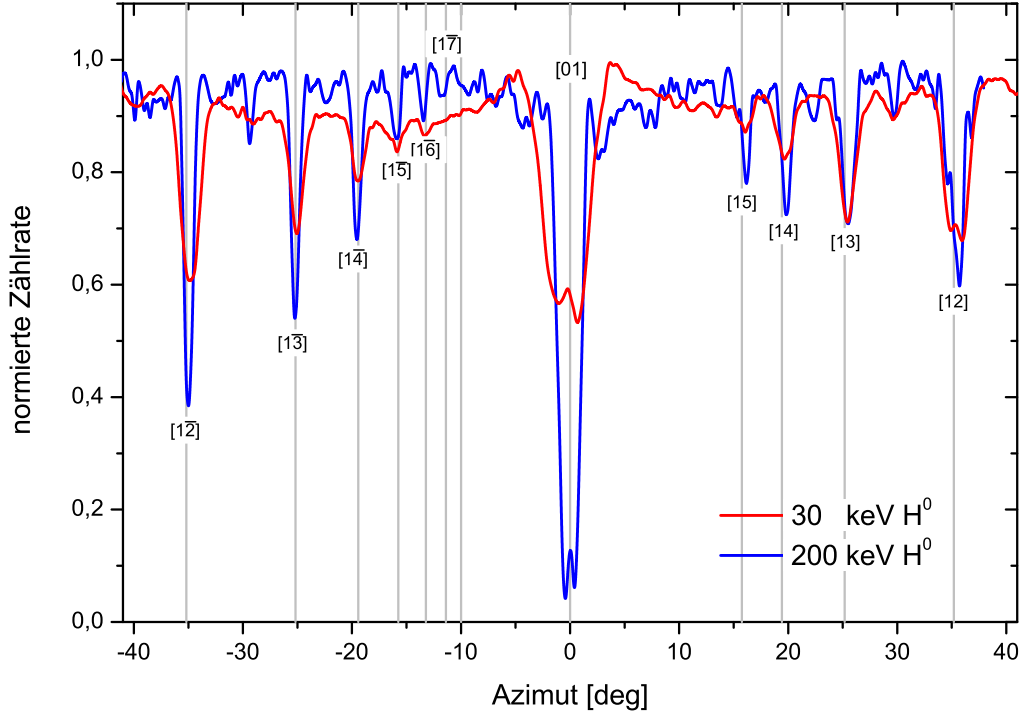


Abb. 2.12: Ionenstrahltriangulation für die Streuung von 30 keV und 200 keV  $H^0$  an Al(110)

stellt.

Wie schon in Abb. 2.12 erkennbar, ist die Breite der Peaks von der Projektilenergie abhängig. Die Breite der Peaks wird durch den Übergangswinkel vom planaren zum axialen Channeling  $\Theta_{ap}$  bestimmt [125].

$$\Theta_{ap}^2 = \frac{\pi}{2} \frac{d_{ap}}{a} \frac{Z_1 Z_2}{d_{hkl} E_0} \Phi\left(\frac{z_{min}}{a}\right) \quad (2.1)$$

Dabei sind  $\Phi(x)$  die Abschirmfunktion des Potentials und  $z_{min}$  der minimale Abstand zur Oberfläche bei Random-Streuung (Streuung entlang hochindizierter Kristallrichtungen).  $\Theta_{ap}$  hängt für eine feste Projektilenergie  $E_0$  vom Abstand  $d_{ap}$  zwischen benachbarten  $[hkl]$ -Atomreihen und der Entfernung  $d_{hkl}$  der Atome innerhalb der  $[hkl]$ -Atomreihe ab. Mit steigendem Index verringert sich  $d_{ap}$ , wohingegen  $d_{hkl}$  ansteigt. Dadurch nimmt die Breite der Peaks im Targetstrom ab.

In Abb. 2.14 sind die Halbwerts- und die Fußbreite des  $[01]$ -Peaks in Abhängigkeit von der reziproken Wurzel der Energie dargestellt. Die in Abb. 2.14 eingezeichneten Geraden zeigen, dass sich die Abhängigkeit der experimentell ermittelten Breiten des  $[01]$ -Peaks der Ionenstrahltriangulationkurve

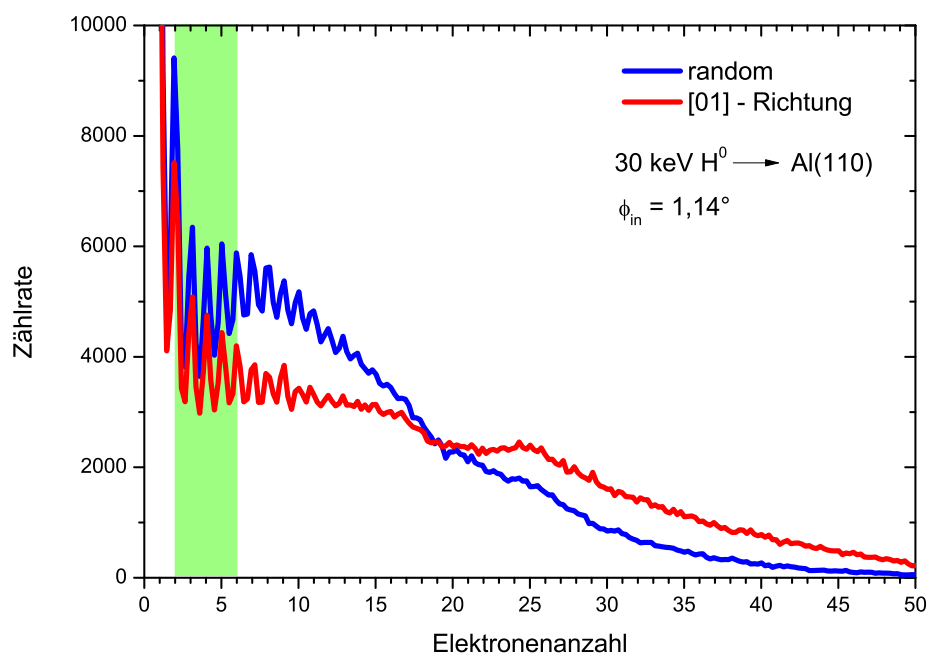


Abb. 2.13: Elektronenzahlspektrum für die Streuung von 30 keV  $H^0$  an Al(110)

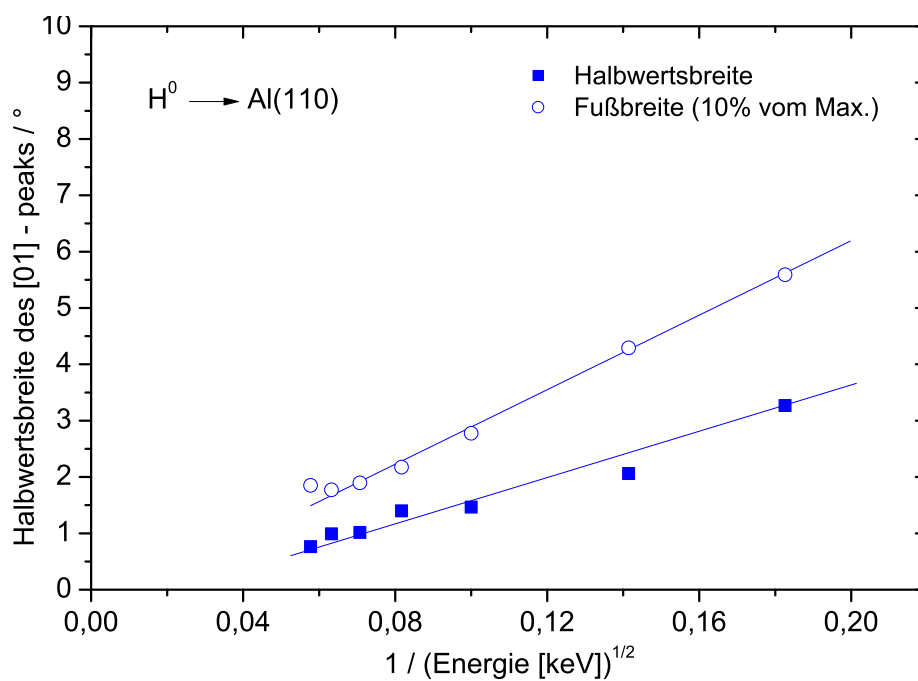


Abb. 2.14: -  
 Peaks]Halbwertsbreite und Fußbreite des [01]-Peaks als Funktion der  
 reziproken Wurzel der Energie des  $H^0$ -Strahls

von der Projektilenergie durch Gleichung 2.1 beschreiben lässt.



### 2.3.3 Auger-Elektronen-Spektroskopie

Die Auger-Elektronen-Spektroskopie (AES) wird zur Analyse der chemischen Zusammensetzung einer Probe durchgeführt [4, 49, 52]. Ausgenutzt wird dabei der sogenannte Augerübergang. Die Probe wird mit Elektronen von etwa 3 keV beschossen, der Bereich auf der Probe, der getroffen wird sollte sehr klein sein ( $< 1 \text{ mm}^2$ ). Dabei werden Festkörperatome ionisiert. Vom Auger-Übergang spricht man, wenn ein Elektron aus einem höherliegenden in einen unbesetzten Zustand übergeht und dabei seine Energie an ein weiteres Elektron überträgt. Dieses Elektron besitzt zusätzlich die kinetische Energie, die der Differenz der beiden Zustände entspricht, es wird Augerelektron genannt (s. Abb. 2.15). Die Spektroskopie der für das jeweilige Element charakteristischen Energieverteilung der emittierten Augerelektronen läßt Rückschlüsse auf die chemische Zusammensetzung der untersuchten Probe zu.

Die Intensität der Augerelektronen wird mit den Sensitivitäten aus dem „Handbook of Auger Electron Spectroscopy“ von Davis et al. [26] ausgewertet. Es werden Auger-Peaks, die zu verschiedenen chemischen Elementen gehören miteinander in Verhältnis gesetzt werden und somit Angaben über die chemische Zusammensetzung der Oberfläche gemacht werden. In den für

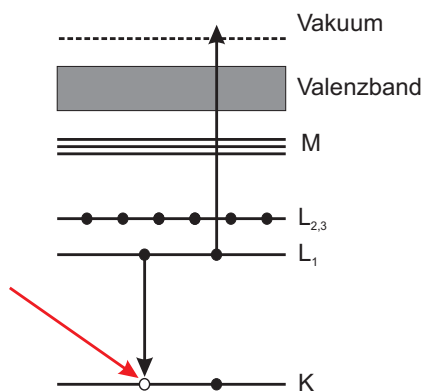


Abb. 2.15: Prinzipskizze zum Auger Effekt

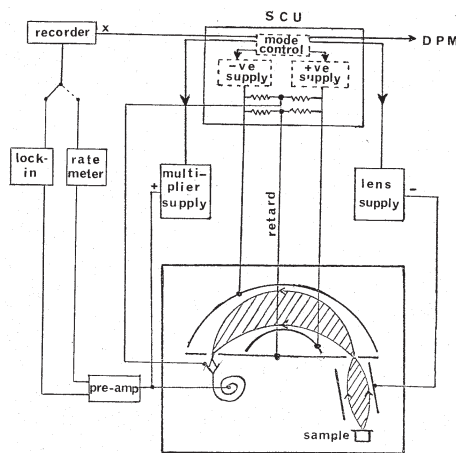


Abb. 2.16: Prinzipskizze des CLAM 100, aus [44]

diese Arbeit durchgeführten Experimenten wurden die Elektronenenergien mit einem CLAM 100 Spektrometer der Fa. VG Instruments GmbH gemessen (prinzipieller Aufbau in Abb. 2.16). Das CLAM 100 ist ein 150°-spärischer Sektoranalysator, der mit einer Eintrittslinse kominiert ist (Combined Linse and Analyzer Module = CLAM). Die Funktionsweise soll hier kurz beschrie-

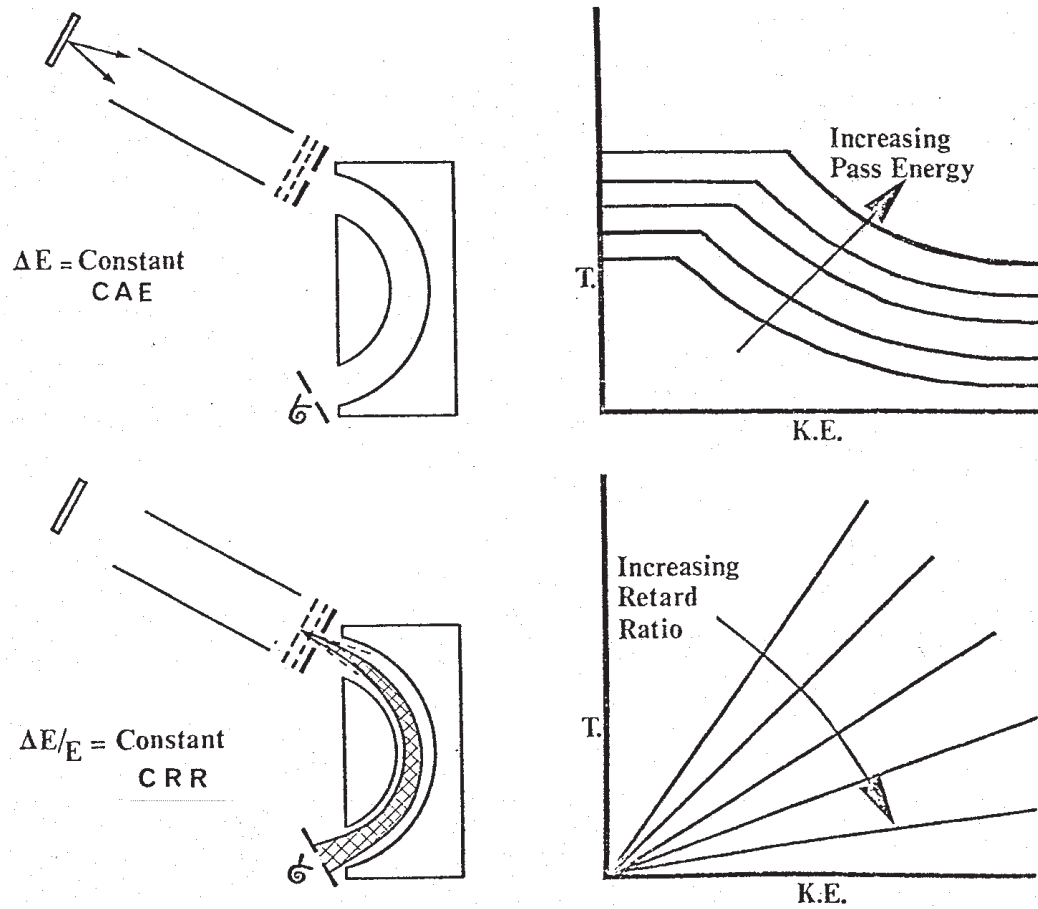


Abb. 2.17: Transmission des Energieanalysators als Funktion der kinetischen Energie der Elektronen, oben: CAE Modus, unten: CRR Modus, aus [44]

ben werden[44]. Wie in Abb. 2.16 angedeutet, werden die vom Target emittierten Elektronen durch ein Linsensystem auf einen Eintrittsspalt fokussiert. Der ideale Weg der Elektronen ist eine Bahn mit dem Kreisdurchmesser  $d = 200 \text{ mm}$ . Nur Elektronen mit genau der „pass energy“  $E_P$  werden dann vom Analysator wieder auf den Austrittsspalt fokussiert und von einem Channeltron nachgewiesen. Das Auflösungsvermögen wird in [44] wie folgt angegeben:

$$\frac{\Delta E}{E_P} = \frac{\Delta r}{d} + \alpha^2. \quad (2.2)$$

Dabei ist  $\alpha$  die halbe Breite der Winkelverteilung der in den Eintrittsspalt gelangenden Elektronen und  $\Delta r$  die Breite des Eintrittsspalt.

Die „pass energy“ wird in den zwei unterschiedlichen Betriebsmodi des Analysators verschieden vorgegeben (s. Abb. 2.17). Im CAE-Modus („con-

stant analyzer energy“) wird die „pass energy“ fest gewählt. Das hat eine feste Energieauflösung des Analysators zur Folge. Im CRR-Modus („constant retard ratio“) steht die „pass energy“ in einem festen Verhältnis zur Energie der Elektronen. Dies führt für kleine Energien zu einer besseren und für hohe Energien zu einer reduzierten Energieauflösung. In den Untersuchungen zu dieser Arbeit wurde das CLAM 100 fast ausschließlich im CRR-Modus betrieben.

### 2.3.4 Beugung langsamer Elektronen

Um periodische Strukturen auf Festkörperoberflächen zu untersuchen werden niederenergetische Elektronen an der Oberfläche gebeugt (*Low Energy Electron Diffraction*, LEED) [49–52]. Dadurch können geordnete Anordnungen von Atomen an der Oberfläche untersucht werden. Amorphe Proben sind aufgrund der fehlenden Periodizität an der Oberfläche nicht zur Untersuchung mit LEED geeignet.

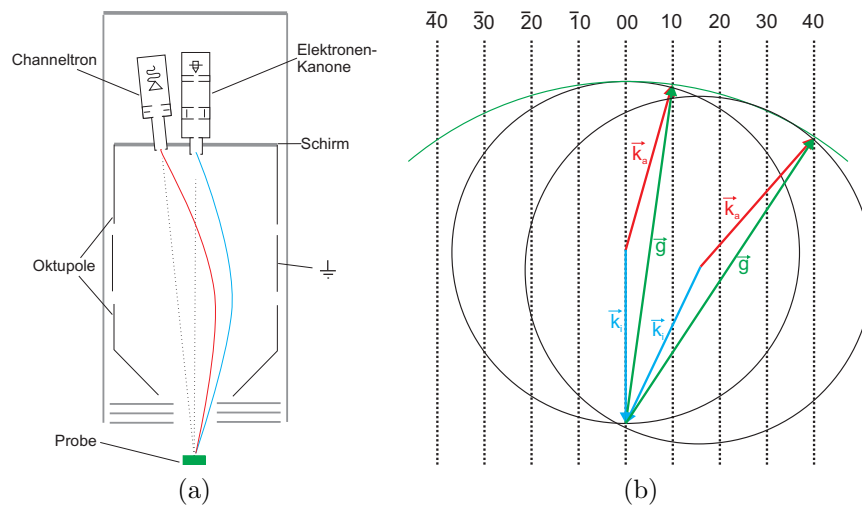


Abb. 2.18: a: SPA-LEED Prinzipskizze, b: Ewaldkonstruktion für SPA-LEED, nach [51]

Für die Untersuchungen zu dieser Arbeit wurde ein SPA-LEED-System (**S**pot **P**rofile **A**nalysis-**L**EED) der Fa. Omicron verwendet (Prinzipskizze in Abb. 2.18 a). Aufgrund der im Vergleich zum konventionellen LEED besseren Nachweisempfindlichkeit für die Elektronen durch ein Channeltron, ist das SPA-LEED-System besser für Experimente an Isolatoroberflächen geeignet.

Aber auch an anderen Proben ist es ein Vorteil, dass der Primärstrom kleiner gewählt werden kann als es beim konventionellen LEED.

In dieser Arbeit soll nur kurz auf das Funktionsprinzip eingegangen werden [50, 51]. Durch Platten in zwei Oktupolanordnungen werden sowohl Einfalls- als auch der Ausfallswinkel der Elektronen variiert. Elektronenkanone und Channeltron sind so dicht beieinander angebracht, dass die Elektronen auf dem Hin- und Rückweg (blau und rot in Abb. 2.18) etwa den gleichen Pfad zurücklegen. Das LEED-Bild wird durch Variation der Ablenkspannung erzeugt, es entsteht durch eine modifizierte Ewald-Konstruktion (Abb. 2.18 b). Der Winkel zwischen einfallendem und ausfallendem Strahl bleibt immer konstant und entspricht genau dem Winkel ( $4^\circ$ ), um den das Channeltron gegen die Elektronenkanone verkippt ist. Nur der Winkel, um den  $\vec{g}$  gegen die Oberfläche verkippt ist, ändert sich. Die daraus resultierende modifizierte Ewald-Kugel hat den Radius  $2k_i$ , ist also doppelt so groß, wie der Radius der konventionellen Ewaldkugel. Wie in Abb. 2.18b zu sehen ist, läßt sich die Beugung als Drehung der Ewaldkugel um einen festen Punkt auf dem (0,0)-Gitterstab beschreiben. Aus der Verdopplung des Radius folgt wiederum, dass man bei gleicher Elektronenenergie einen größeren Bereich des reziproken Gitters aufnehmen kann. Das ist ein großer Vorteil gegenüber dem konventionellen LEED.

Auf den Einfluss der Qualität der zu untersuchenden Probe auf das LEED-Bild, wird an den entsprechenden Stellen genauer eingegangen.

# Kapitel 3

## Untersuchungen an MgO(001) und Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001)

Die Untersuchung von MgO(001) - und Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) -Einkristallen wurden durchgeführt, weil diese Kristalle in vielen Anwendungen [17, 31, 36, 37] als Substrate benutzt werden und deshalb bezüglich ihrer physikalischen Eigenschaften untersucht werden.

In den Experimenten zu dieser Arbeit wurden einerseits die Elektronenemission bei der Streuung schneller Atome untersucht, andererseits wurden Schichtstrukturen auf die Einkristalle aufgebracht und auf ihre Eigenschaften bezüglich der Elektronenemission untersucht [10].

### 3.1 Kristallpräparation

Die Kristalle wurden zunächst als Rohlinge (5 mm hoch, Durchmesser 9 oder 12 mm) von der Fa. CrysTec geliefert und mit einer Nut zur Befestigung versehen [23, 24]. Die Qualität der jeweiligen Fläche für die Streuexperimente wird von der Fa. CrysTec mit einem Fehlschnitt von 0,3° angegeben. Diese Angabe bezeichnet die Abweichung von der MgO(001)- bzw. der Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001)-Fläche. Durch mechanische Politur mit Korngrößen von 20 bis 0,05  $\mu\text{m}$  wurden die Flächen von Herrn J. Sölle im Präparationslabor des Instituts für Physik bearbeitet. Die von der Fa. CrysTec gelieferten Zylinder wurden mit einer Diamantdrahtsäge zersägt. Anschließend wurde eine Nut für die spätere Befestigung des Kristalls eingefräst. Dann erfolgte die Präparation einer Stirnfläche. Dafür wurde die Oberfläche in drei Schritten mit den Korngrößen 20  $\mu\text{m}$ , 12  $\mu\text{m}$  und 5  $\mu\text{m}$  Bornitrid geläppt. Anschließend wurde die Oberfläche noch etwa jeweils 2 Stunden mit 1,2  $\mu\text{m}$  und 0,55  $\mu\text{m}$

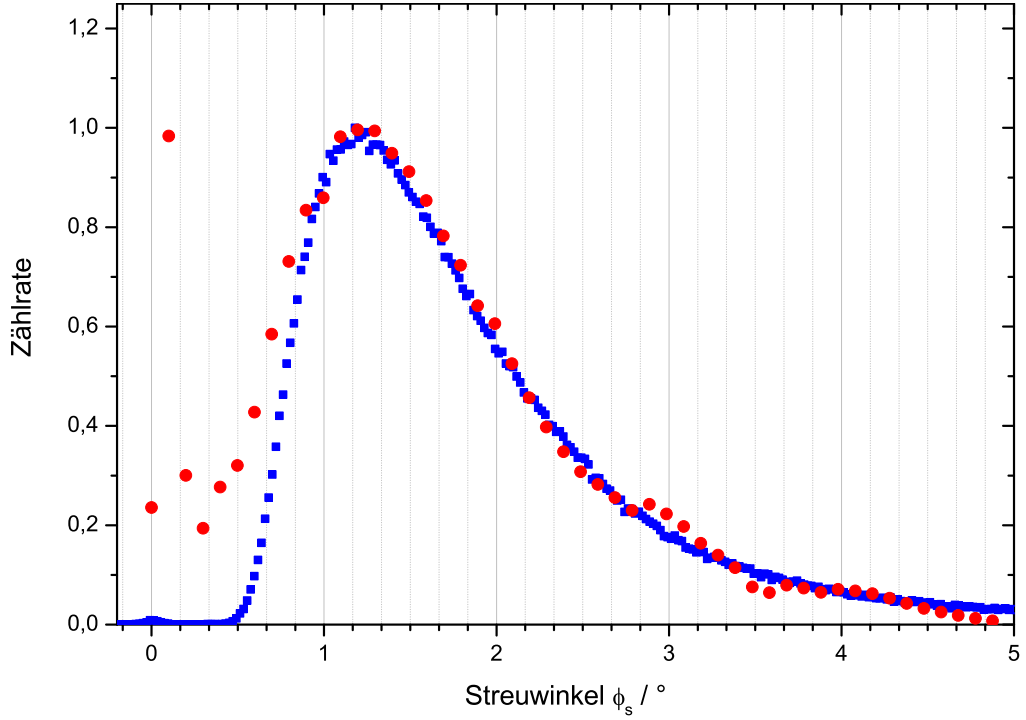


Abb. 3.1: Streuverteilungen für die Streuung von 23,5 keV  $\text{Ar}^0$  an  $\text{MgO}(001)$ ,  $\phi_{\text{in}} = 1,2^\circ$ , rote Kreise: Präparationszustand nach Sputtern und Ausheilen bis  $500^\circ\text{C}$ , blaue Kreise: außerhalb der UHV-Kammer gespaltenen Fläche, ohne weitere Präparation

$\text{Al}_2\text{O}_3$ -Körnern poliert. Dabei beginnt die Oberfläche optisch zu reflektieren. Bei den  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ -Kristallen wurde die Fläche noch abschließend mit  $0,05 \mu\text{m}$   $\text{SiO}_2$  poliert.

Entsprechend präparierte Kristalle zeigen nach dem Entfernen der durch das Abpumpen nach dem Einbau entstandenen Kohlenstoffschicht durch kurzes Heizen auf etwa  $500^\circ\text{C}$  und/oder Sputtern mit  $\text{Ar}^+$  Streuverteilungen wie in Abb. 3.1 (rote Kreise) am Beispiel der Streuung von 23,5 keV  $\text{Ar}^0$  an  $\text{MgO}(001)$  dargestellt. Obgleich die Streuung nicht völlig undefiniert ist, weist die Oberfläche offensichtlich eine ausgeprägte Defektstruktur auf. Die Verteilung ist nicht symmetrisch, und die von Pfandzelter [83] beschriebenen Strukturen an den Flanken sind nicht zu erkennen. Nur das Absinken der Zählrate für Streuwinkel  $\phi_s > 4^\circ$  auf unter 5% läßt auf eine definierte Streufläche schließen. Für die niedrige Zählrate im unterspekularen Bereich ( $\phi_s < 1^\circ$ ) ist die Abschattung des Targets verantwortlich, Projektile mit solch kleinem Streuwinkel können aus geometrischen Gründen den Detektor nicht mehr erreichen (vgl. Abb. 2.8). Die volle Halbwertsbreite der Streuverteilung

kann mit  $\text{FWHM} \approx 1,5^\circ$  angegeben werden.

Die zweite in Abb. 3.1 dargestellte Verteilung (blau) wurde an einer Spaltfläche eines außerhalb der UHV-Kammer gespaltenen Kristalls aufgenommen [16]. Diese Streuverteilung ähnelt der o.g. und weist auf vergleichbare Defektstrukturen hin. Im Regime der streifenden Streuung sind keine definierten Experimente an diesen Oberflächen möglich, die Defektstrukturen sind zu stark ausgeprägt.

Trotzdem wurden diese Oberflächen mit Standardmethoden der Oberflächenanalytik untersucht. In Abb. 3.2 ist eine LEED-Aufnahme dargestellt, welche an einem derart präparierten  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ -Kristall aufgenommen wurde. Zu erkennen ist die dreizählige Symmetrie der  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ -Oberfläche. Die Breite der LEED-Reflexe läßt sich auf Aufladungseffekte an der Oberfläche durch den für das LEED-Experiment nötigen Elektronenbeschuss ( $I < 0,1 \mu\text{A}$ ) zurückführen. Entsprechende LEED-Aufnahmen sind jedoch direkt nach dem Einbau, also ohne Präparation im UHV, nicht möglich. Zu diesem Zeitpunkt sind keine Spots in den LEED-Aufnahmen erkennbar. Dies läßt darauf schließen, dass die Sputter-Ausheil-Zyklen zumindest die Verschmutzung der Oberfläche durch Kohlenstoff beseitigen. Diese Säuberung wird durch das in Abb. 3.3 gezeigte Augerspektrum bestätigt. Dort können nur Sauerstoff ( $E \approx 500 \text{ eV}$ ) und Aluminium ( $E \approx 1300\text{-}1400 \text{ eV}$ ) nachgewiesen werden, eine Bedeckung mit Kohlenstoff ( $E = 272 \text{ eV}$ ) ist, im Gegensatz zu entsprechenden Spektren die direkt nach dem Einbau in die UHV-Kammer aufgenommen wurden, unterhalb der Nachweisgrenze von etwa 5%.

Es wurden große Anstrengungen unternommen, um die Oberfläche zu verbessern. So wurde mehrere Tage mit bis zu  $20 \mu\text{A}$  gesputtert, Sauerstoff sowohl während des Sputterns als auch vor, während und nach dem Heizen zugegeben (bis zu  $5 \cdot 10^{-5} \text{ mbar}$ ) oder die Kristalle über mehrere Stunden geheizt. Erst das Ausheilen des Kristalls mittels des in Kap. 2.2.2 vorgestellten Elektronenstoßheizers brachte einen Erfolg.

In Abb. 3.4 sind Streuverteilungen nach dem Ausheilen des Kristalls bis zu  $1800 \text{ K}$  dargestellt. Die Breiten der Streuverteilungen können nun mit  $\text{FWHM} = 0,25^\circ$  im Falle der Streuung von  $23,5 \text{ kV Ar}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  unter einem Streuwinkel  $\phi_s = 3,0^\circ$  und  $\text{FWHM} = 0,2^\circ$  für die Streuung an  $\text{MgO}(001)$  unter einem Streuwinkel  $\phi_s = 1,5^\circ$  angegeben werden. Die Streuverteilungen zeigen weder für unter- noch für überspekulare Streuwinkel die von Pfandzelter beschriebenen Strukturen [83]. Die Terrassenbreiten der Oberflächen betragen also mehrere hundert Å.

Diese Kristalloberflächen sind unter UHV Bedingungen mehrere Stunden stabil. Experimentell bedeutet dies, dass das Arbeiten über einen Messtag möglich ist. Der starke Druckanstieg durch das Auftauen der am Tage mit flüssigem Stickstoff gefüllten Kühlfalle nach einem Messtag führt zu einer

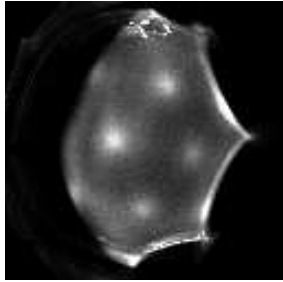


Abb. 3.2: LEED-Aufnahme an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ , der Schatten im linken Teil der Aufnahme ist auf einen das SPA-LEED-System zurückzuführen, Präparation wie Abb. 3.1

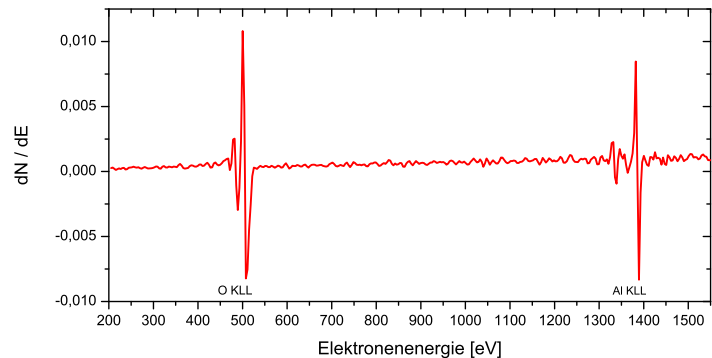


Abb. 3.3: Augerelektronenspektroskopie an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ , erkennbar sind ausschließlich Magnesium- und Sauerstofflinien, Elektronenenergie  $E_{kin}=3$  keV, Präparation wie Abb. 3.1

Bedeckung des Kristalls mit Kohlenstoff. Eine am nächsten Morgen vor dem erneuten Heizen aufgenommene Streuverteilung ist etwa doppelt so breit, wie in den Abb. 3.4 dargestellt.

Die Kehrseite dieses Erfolges bei der Präparation der Kristalle ist, dass im Rahmen der Arbeiten zu dieser Dissertation die Kristalle während mehr als 20 bis 30 Heizzyklen gespalten werden. Die Kristalle bekamen zunächst Risse entlang senkrecht zur Oberfläche verlaufender Kristallflächen. Nach und nach zerbrechen die Kristalle, und es wird immer schwieriger, Bereiche zu finden, die groß genug sind, um noch experimentieren zu können.

Es wurden viele Versuche unternommen diese Rissbildung zu verhindern oder zumindest zu verzögern. Zunächst wurde versucht, alle Spannungen, die von außen aufgrund der Halterung auf die Kristalle wirkten, zu minimieren. Die Risse treten aber auch auf, wenn die Kristalle zu den Seiten hin völlig frei auf einem Molybdän-Blech lagen. Im nächsten Schritt wurde versucht die Kristalle sehr langsam an die hohen Temperaturen heranzuführen, also in 30 Minuten auf Maximaltemperatur zu erwärmen und dann wiederum in 30 Minuten abzukühlen. Diese Methode zeigt positive Auswirkungen auf die Rissbildung, hatte aber den großen Nachteil, dass während der langen Zeit, in der die UHV-Kammer so hohen Temperaturen ausgesetzt ist, der Druck in den Bereich von  $10^{-8}$  mbar stieg und deshalb die Oberflächen nicht so sauber



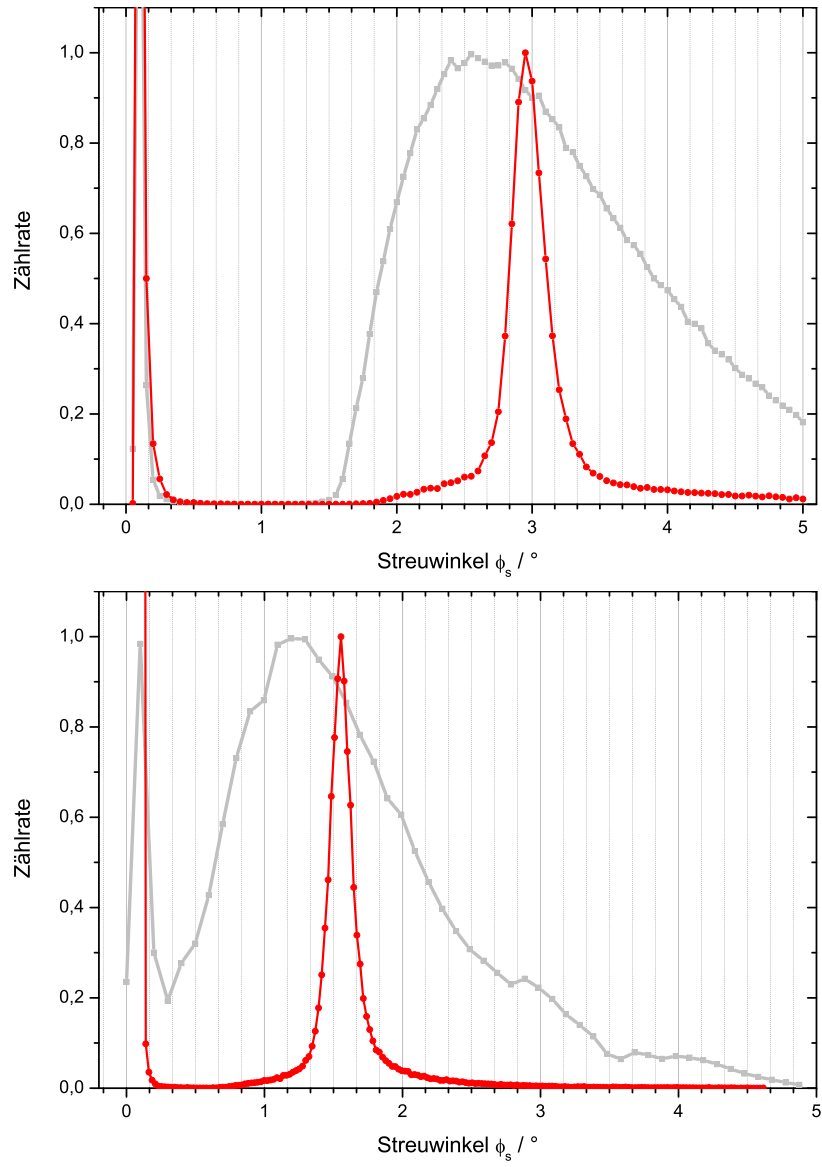


Abb. 3.4: Streuverteilungen für die Streuung von 23,5 keV  $\text{Ar}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  (oben) bei  $\phi_{\text{in}} \approx 3^\circ$  und  $\text{MgO}(001)$  (unten) bei  $\phi_{\text{in}} \approx 1,5^\circ$ , jeweils vor (graue Kurve) und nach (rote Kurve) der Präparation

blieben, wie bei kürzeren Heizzyklen. Die Präparation der Kristalle kann als Grund für das Zerbrechen ausgeschlossen werden. Es konnte kein Unterschied zwischen Kristallen, die durch Spalten oder durch Sägen aus einem Rohling gewonnen wurden, festgestellt werden.

### 3.2 Elektronenemission an $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$

An Magnesiumoxid und Aluminiumoxid können, weil sie sich als Isolatoren aufladen, während des Sputterns keine Targetstromkurven aufgenommen werden. Die Kristalle leuchten bei Beschuss mit intensiven Ar-Strahlen bläulich im Falle von  $\text{Al}_2\text{O}_3$  und leicht grünlich im Falle von  $\text{MgO}$ . Außerdem

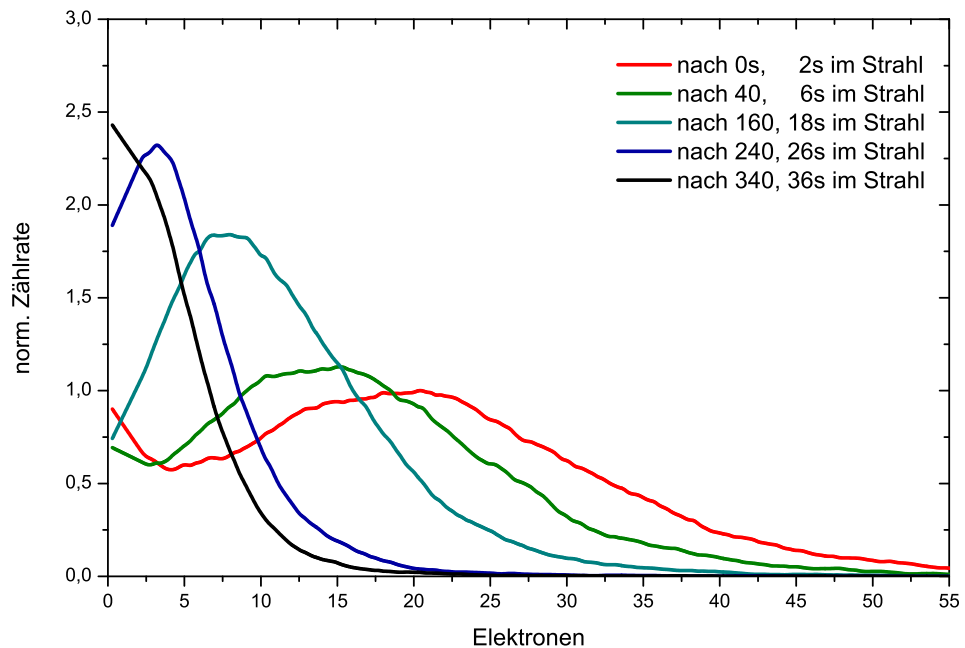


Abb. 3.5: Elektronenemissionsspektren bei der Streuung von 30 keV  $\text{H}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ ,  $\phi_{\text{in}} \approx 2^\circ$

wird eine von der Messzeit abhängige Ablenkung des Ionenstrahls beobachtet. Trotz dieser Aufladungen ist die Säuberung der Kristalle durch das Sputtern nachweisbar. Um den Aufladungen entgegenzuwirken, wurden die Kristalle während des Sputterns mit Elektronen aus einer Elektronenkanone beschossen. Dafür wurden Ströme  $I < 1 \mu\text{A}$  und Energien unter 20 eV

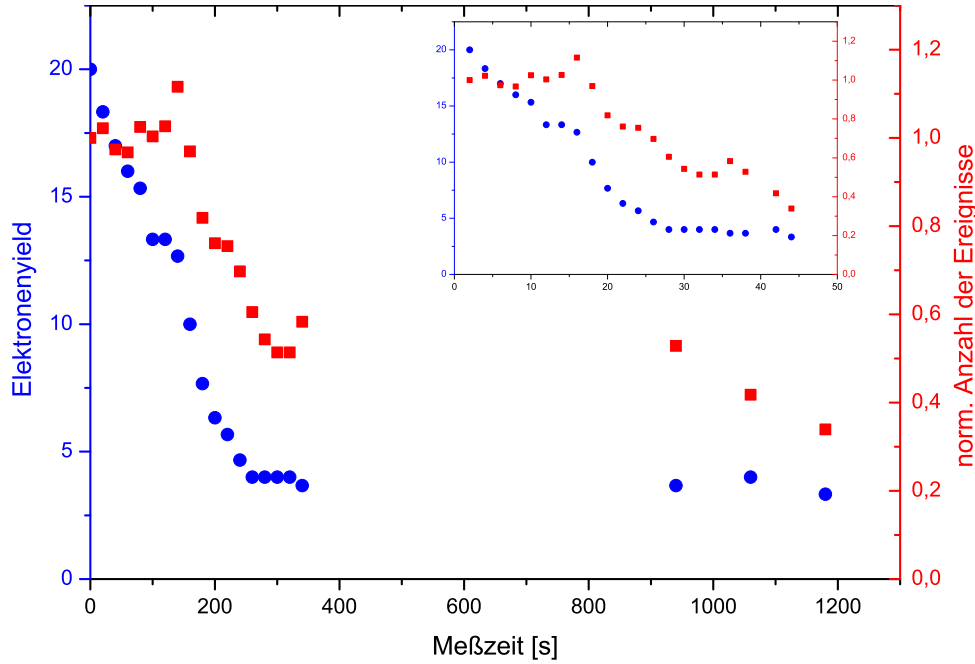


Abb. 3.6: Elektronenemission in Abhängigkeit von der Messzeit bei der Streuung von 30 keV  $H^0$  an  $Al_2O_3(0001)$ ,  $\phi_{in} \approx 2^\circ$

gewählt. Der beobachtbare Effekt ist, dass die vom Target gestreuten Projektile in etwa unter dem für neutrale Projektile zu erwartenden Streuwinkel detektiert werden, und nicht durch das Feld des geladenen Kristalls zu kleineren Streuwinkeln abgelenkt werden. Durch die „Berieselung“ der Oberfläche mit Elektronen aus der Elektronenkanone wird der Aufladung der Kristalle entgegengewirkt und das Sputtern der Oberfläche ist mit einem Ionenstrahl möglich.

Wie im über den azimuthalen Winkel aufgetragenen Targetstrom so sind auch im Strom, der durch die gestreuten Projektile auf einem Blech verursacht wird, keine Strukturen zu erkennen, die auf die Symmetrie der Oberflächen schließen lassen.

In den mittels Elektronendetektor gewonnenen Ionenstrahltriangulationskurven (vgl. Kap. 2.3.2) ist an den Oxiden nur in kleinen azimuthalen Winkelintervallen die Symmetrie der Oberfläche erkennbar (auf eine Darstellung wird daher verzichtet).

In Abb. 3.5 sind mit dem Elektronendetektor aufgenommene Elektronenanzahlspektren für die Streuung von 30 keV  $H^0$  an  $Al_2O_3(0001)$  dargestellt. Die rote Kurve entspricht einem Spektrum, welches innerhalb von zwei Sekunden, ohne dass der Ionenstrahl vorher am Target gestreut wurde, aufge-

nommen wurde. Für die Aufnahme weiterer Spektren wurde jeweils für 18 Sekunden der Strahl ausgeblendet und dann 2 Sekunden lang das jeweilige Elektronenemissionsspektrum gemessen. Eine Auswahl dieser Spektren ist in Abb. 3.5 dargestellt. Zu erkennen ist, dass sich die Verteilungen schon nach wenigen Sekunden, in denen der Kristall dem Atomstrahl ausgesetzt ist, zu kleineren Elektronenanzahlen hin verschieben.

In Abb. 3.6 ist in blau (Quadrate) die Ausbeute der Elektronenemission dargestellt. Sie fällt von 20 Elektronen pro Projektil auf etwa 4 Elektronen nach 200 s Messzeit ab. Das bedeutet, dass nicht mehr alle Elektronen pro Streueignis den Kristall verlassen können. Es zeigt sich, dass nach etwa der 15. Messung, das entspricht etwa 30 s Zeit unter Einfluss des Projektilstrahls für den Kristall und rund 5 Minuten Messzeit, sich die Anzahl der nachgewiesenen Elektronen nicht mehr wesentlich verändert. Auch nach weiteren 20 Minuten, d.h. einer längeren Zeit ohne Beschuss, hat sich das System nicht erholt. Erst ein Heizen des Kristalls auf etwa 1800 K führt wieder zu Verhältnissen wie vor dem erstmaligen Beschuss der Kristalloberfläche.

In rot sind in Abb. 3.6 die Inhalte der Flächen unter den Spektren dargestellt. Dies entspricht der Anzahl der Ereignisse, weil man bei dem verwendeten Projektilstrom (etwa 1000 Projektil pro Sekunde) davon ausgehen kann, dass nur Elektronen gleichzeitig<sup>1</sup> auf dem Detektor auftreffen, die auch vom selben Projektil ausgelöst wurden. Ein interessanter Aspekt ist, dass innerhalb der ersten 20 Sekunden offenbar noch alle Ereignisse detektiert wurden, auch wenn einzelne Elektronen schon nicht mehr den Detektor erreicht haben. Erst nach diesen 20 s gibt es dann offenbar Ereignisse für welche nicht nur nicht mehr die volle Elektronenausbeute, sondern auch das Streueignis insgesamt nicht mehr detektiert werden kann.

Es bleibt also festzustellen, dass es nicht möglich war, an den Isolatorien  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  und  $\text{MgO}(001)$  Experimente zur Emission von Elektronen durchzuführen. Die Elektronenzahlspektren verschieben sich aufgrund der Aufladungen zu kleineren Elektronenanzahlen, Kristall- oder richtungsabhängige Eigenschaften in den Elektronenzahlspektren ließen sich nicht auflösen.

---

<sup>1</sup>mit gleichzeitig ist hier innerhalb der Zeitauflösung des Elektronendetektors gemeint

### 3.3 Studien zum lagenweisen Wachstum von Vanadiumoxid auf Magnesiumoxid

Eine mögliche Anwendung an den präparierten Isolator-kristallen ist das kontrollierte Wachstum von Metall- oder Metalloxidschichten [21, 79, 90]. In diesem Abschnitt wird das Wachstum von  $V_xO_y$  auf  $MgO(001)$  dargestellt.

Zur Kontrolle des Wachstums der epitaktisch gewachsenen Schicht wurde die Reflektivität des Kristalls für 30 keV  $H^0$  Projektile studiert. Ähnlich wie bei der Beugung hochenergetischer Elektronen (reflection high-energy electron diffraction, RHEED) werden mit dieser Methode Wachstumsoszillationen bei lagenweisem Wachstum beobachtet [61]. Diese Oszillationen werden beobachtet, weil sich periodisch mit dem lagenweisen Wachstum die Morphologie der Oberfläche ändert. Das führt mit den gleichen Argumenten wie bei der Diskussion zur Breite der Streuerverteilungen in Kap. 2.3.1 zu einer Änderung der Reflektivität bei der Streuung von schnellen Atomen an der Oberfläche [7, 8].

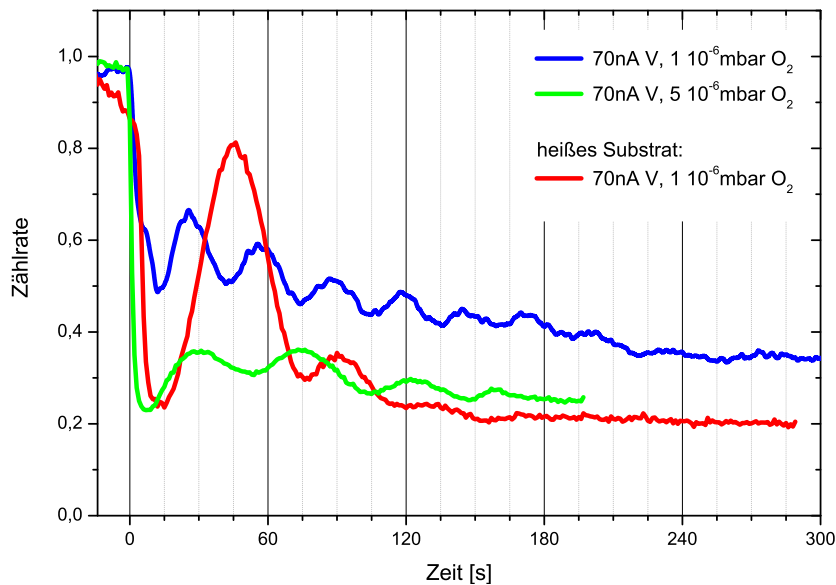


Abb. 3.7: Wachstumskurven für das Wachstum von  $V_xO_y$  auf  $MgO$ , Streuung von 30 keV  $H^0$ ,  $\phi_{in} \approx 1,5^\circ$

In Abb. 3.7 sind solche Wachstumskurven für verschiedene Streubedingungen dargestellt. Die Anzahl der jeweils aufgedampften Lagen lässt sich durch Abzählen der Maxima bestimmen. Für die hier dargestellten Kurven

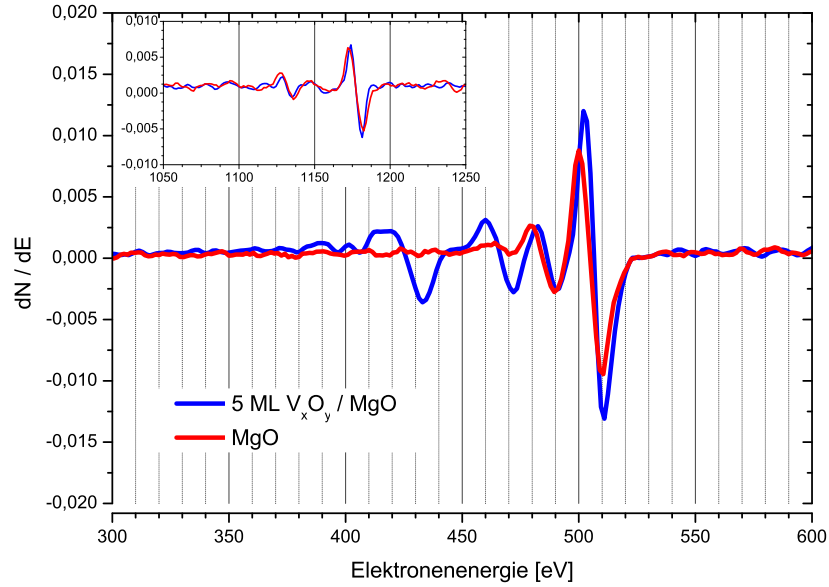


Abb. 3.8: Augerspektrum für 5 Monolagen  $V_xO_y$  auf MgO (blau), Vgl. mit MgO (rot)

wurden der Partialdruck des Sauerstoffs (blaue und grüne Kurve) und die Temperatur des Substrates (rot) variiert. Mittels RHEED wurden Wachstumsoszillationen schon von Rata et al. für das Wachstum von 50 ML  $V_xO_y$  auf MgO gezeigt [89, 91].

Die Augerelektronenspektren zur chemischen Analyse der aufgedampften Schicht sind in Abb. 3.8 dargestellt. Das Spektrum, welches vor dem Bedampfen aufgenommen wurde (rote Kurve), zeigt keine Verunreinigungen durch Kohlenstoff, es sind nur die Peaks für Sauerstoff und Magnesium sichtbar. Nach der Bedampfung mit Vanadium ist es sehr schwierig ein Augerspektrum aufzunehmen, das nicht durch Aufladungseffekte verschoben ist. Die Parameter, die zu den Aufladungen führen, sind u.a. die Schichtdicke und die Messzeit der Augermessung. Augerspektren an mehr als fünf Monolagen  $V_xO_y$  konnten nur stark verzehrt oder nur für sehr kurze Zeiten gemessen werden. Für eine Aussage über die Oxidationsstufe (wie z.B. in [98] und [82]) ist die Auflösung des Spektrums nicht ausreichend. Die Vanadium -  $L_{23}M_{23}M_{45}$  - Linie bei etwa 470 eV sollte für  $V_2O_3$  bei 473 eV und für  $V_2O_5$  bei 468 eV liegen. Für solche Analysen sind die vorliegenden Daten nicht geeignet.

LEED-Bilder ließen sich aufgrund der Aufladungseffekte an den aufgedampften  $V_xO_y$  - Oberflächen nicht aufnehmen. Wegen dieser großen Defizite bei der Charakterisierung der auf den Isolator Magnesiumoxid aufgetragenen

Vanadiumoxidschichten sollte es von Vorteil sein, dass Wachstum von  $V_xO_y$  auf Metalloberflächen zu untersuchen.

### 3.4 Beugung von schnellen Atomen an MgO(001)

Die Methode der Beugung schneller Atome (Fast Atom Diffraction, FAD) wird erfolgreich an Metallen, Ionenkristallen und auch an Substraten auf Metalloberflächen angewendet. In diesem Abschnitt soll nun gezeigt werden, dass diese Methode an der Isolatoroberfläche MgO(001) eingesetzt werden kann. Die Standardmethoden der Oberflächenphysik wie LEED, AES und STM sind an Isolatorkristallen nicht oder nur eingeschränkt anwendbar, weil sich die Isolatoren während der Experimente aufladen.

Die Beugung von Teilchen mit endlicher Ruhemasse ist bei der Elektronenbeugung (z.B. LEED) oder der Beugung von thermischen He-Atomen etabliert [32, 87, 116]. Dabei ist die de-Broglie-Wellenlänge  $\lambda_{dB}$  von Elektronen mit  $E_{\text{kin}} = 100$  eV und die de-Broglie-Wellenlänge für He-Atome mit  $E_{\text{kin}} \approx 50$  meV in der Größenordnung der Gitterkonstanten von Festkörpern. In aktuellen Untersuchungen ist es auch gelungen Beugung für keV nachzuweisen, obwohl  $\lambda_{dB}$  viel kleiner ist als die Gitterkonstante [95, 103].

Zur experimentellen Realisation von Beugungsexperimenten mit schnellen Helium-Atomen werden die Projektile entlang von niedrig indizierten Kristallrichtungen gestreut. Die Helium-Atome werden dann von dieser Atomkette geführt (axiales channeling) [42]. Die Bewegung eines Projektils kann im Regime der streifenden Streuung in eine „schnelle“ Bewegung parallel zur Kette und eine „langsame“ Bewegung senkrecht zu Kette zerlegt werden. Die beiden voneinander separierten Energien  $E_{\parallel}$  und  $E_{\perp}$  unterscheiden sich für die streifende Streuung ( $\phi_{in} \approx 1^\circ$ ) um ca. vier Größenordnungen:

$$E_{\parallel} = E_0 \cos^2(\phi_{in}) \approx E_0 \quad (3.1)$$

$$E_{\perp} = E_0 \sin^2(\phi_{in}) \approx 10^{-4} E_0 \quad (3.2)$$

Weil in der Kontinuumsnäherung die Wellenfunktion in einen senkrechten und einen parallelen Anteil separiert werden kann, gilt dies auch für die de-Broglie-Wellenlänge.  $\lambda_{dB\parallel}$  und  $\lambda_{dB\perp}$  eines als Materiewelle beschriebenen Projektils lassen sich separieren gemäß:

$$\lambda_{dB\parallel} = \frac{h}{m v_{\parallel}} = \frac{h}{\sqrt{2 m E_0}} \quad \text{und} \quad \lambda_{dB\perp} = \frac{h}{m v_{\perp}} = \frac{h}{\sqrt{2 m E_{\perp}}} \quad (3.3)$$

Dabei ist  $h$  das Plancksche Wirkungsquantum und  $m$  die Projektilmasse. Die Wellenlänge  $\lambda_{dB\perp}$  ist im Gegensatz zur etwa zwei bis drei Größenordnungen kleineren Wellenlänge  $\lambda_{dB\parallel}$  von gleicher Größenordnung wie typische Atom-Atom-Abstände in Festkörpern. Das ist für die Auflösung der Beugungslinien



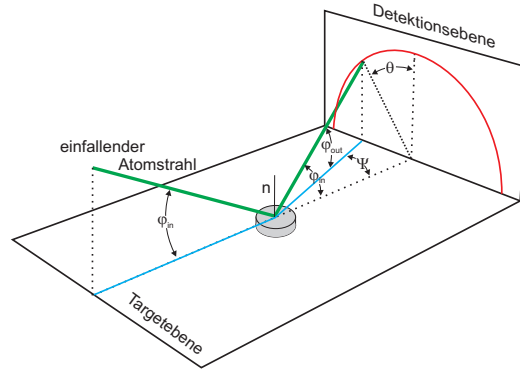


Abb. 3.9: Skizze der Streugeometrie für die Regenbogenstreuung, aus [102]

von an der Kristalloberfläche gestreuten Projektilen eine notwendige Voraussetzung. Die Position der Beugungsstrukturen auf der Detektionsfläche ist gegeben durch die Bragg-Bedingung [104]:

$$n \lambda_{dB} = d \sin \Psi \quad (3.4)$$

$$\Leftrightarrow$$

(Näherung für streifende Streuung)

$$n \lambda_{dB\perp} = d \sin \theta \quad (3.5)$$

Der geometrische Zusammenhang zwischen dem azimuthalen Austrittswinkel  $\Psi$  und dem Ablenkwinkel  $\theta$  ist in Abb. 3.9 illustriert.

Ein Beispiel für die Beugung von  $H_2$  bei der Streuung an  $MgO(001)$  ist in Abb. 3.10 dargestellt. In (a) ist die Streuverteilung für die Streuung von 0,5 keV  $H_2$  entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung der  $MgO(001)$ -Oberfläche für den Einfallswinkel  $\phi_{in} = 1,05^\circ$  gezeigt. Man erkennt neben dem zentralen Maximum bei  $\Psi = 0^\circ$  weitere Maxima bis zur 4. Ordnung. Für Abb. (b) wurden diese Ereignisse auf die Abszisse, also den azimuthalen Austrittswinkel  $\Psi$  projiziert. In dieser Darstellung erkennt man, dass die Peaks gut voneinander getrennt und äquidistant sind. Die Ordnung  $n$  des jeweiligen Maximums wurde in Abb. (c) als Funktion des azimuthalen Austrittswinkels  $\Psi$  dargestellt. Ein Fit an die Daten (rote Linie in Abb. 3.10c) ergibt für diese Senkrechtenergie einen mittleren Beugungslinienabstand von  $\Delta\Psi = 0,1702^\circ \pm 0,0009^\circ$ . Der hier angegebene Fehler ist der statistische Fehler, der sich aus der Anpassung der Daten an die Gerade ergibt. Dieser statistische Fehler ist gegenüber der systematischen Unsicherheit, die sich aus der Eichung des Channelplates ergibt, zu vernachlässigen. Der systematische Fehler für die Bestimmung des Beugungslinienabstandes kann mit  $\pm 0,01^\circ$  angegeben werden.

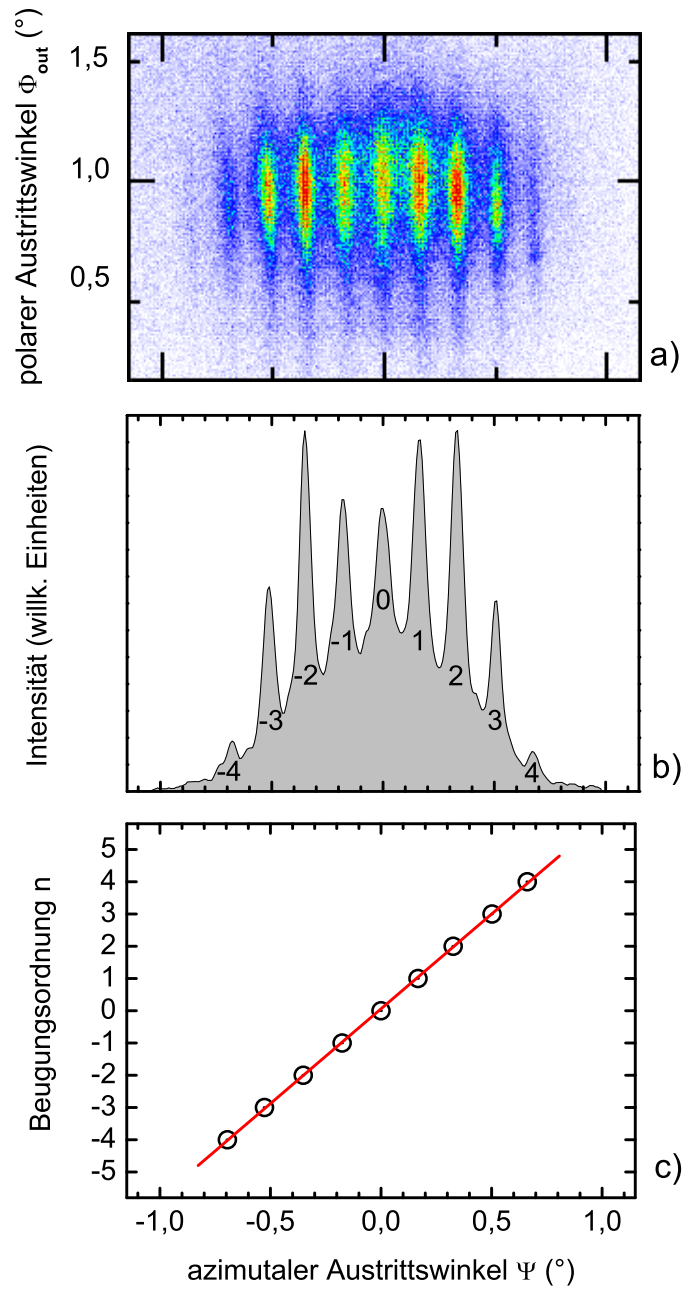


Abb. 3.10: Streuung von  $\text{H}_2$  (0,5 keV) an  $\langle 110 \rangle \text{MgO}(001)$ , Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 1,05^{\circ}$ , a) 2 dim. Beugungsbild, b) Projektion des Beugungsbildes auf den azimuthalen Austrittswinkel  $\Psi$ , c) Darstellung der Ordnung der Beugungsmaxima als Funktion des azimuthalen Austrittswinkels  $\Psi$  zur Bestimmung des Beugungslinienabstandes

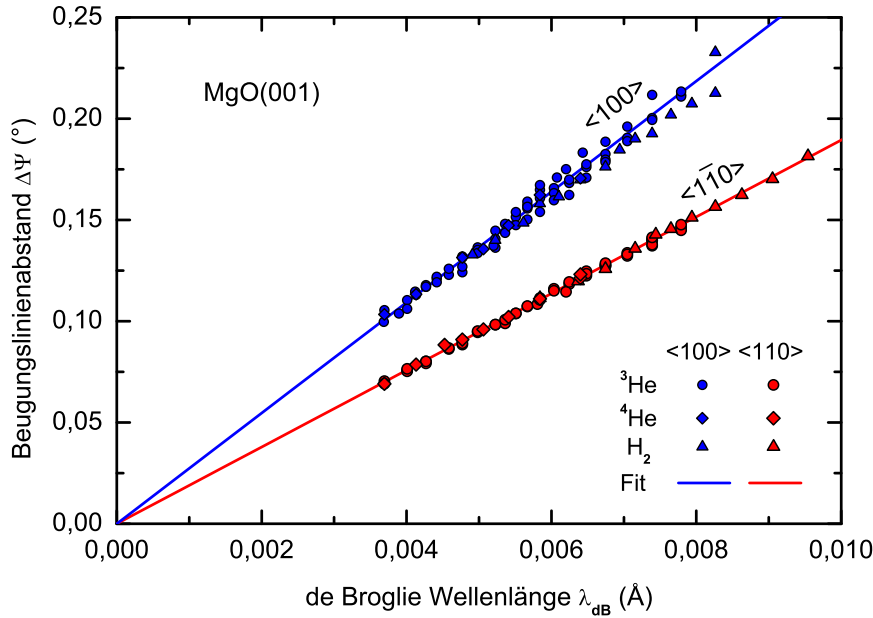


Abb. 3.11: Bestimmung der Kanalbreite  $d$  für den  $\langle 100 \rangle$ - und den  $\langle 110 \rangle$ -Kanal durch Fit des Beugungslinienabstandes an Gleichung 3.5

Beugungslinienabstände  $\Delta\Psi$  wurden auf diese Weise für die Streuung von  $^3\text{He}$ ,  $^4\text{He}$  und  $\text{H}_2$  an  $\text{MgO}(001)$  entlang der Richtungen  $\langle 100 \rangle$  und  $\langle 110 \rangle$  bestimmt und in Abb. 3.11 als Funktion der de-Broglie-Wellenlänge  $\lambda_{dB}$  aufgetragen. Nach Gleichung 3.5 ist der Beugungslinienabstand  $\Delta\Psi$  für die Beugung an einer bestimmten Struktur mit dem Symmetrieabstand  $d$  nur von der Senkrecht-De-Broglie - Wellenlänge  $\lambda_{dB\perp}$  abhängig. Die experimentellen Daten zeigen diese lineare Abhängigkeit. Durch einen Fit an die Daten können die jeweiligen Kanalbreiten  $d$  für die beiden Richtungen bestimmt werden:

	theoretisch [13, 58, 118]	Experiment
$\langle 100 \rangle$	$d = 2,106$	$d = 2,10 \pm 0,07$
$\langle 110 \rangle$	$d = 2,98$	$d = 3,02 \pm 0,09$

Die Abweichungen der experimentell bestimmten Kanalbreiten von den theoretischen liegen innerhalb der Fehler, die für die Bestimmung des Beugungslinienabstandes mittels des Channeltrons angenommen wurden.

Damit ist demonstriert worden, dass die Methode der Beugung schneller

Atome am Isolatorkristall  $\text{MgO}(001)$  erfolgreich einzusetzen ist. Ausgehend von diesen Erkenntnissen wurden Untersuchungen an mit geordneten Adsorbatstrukturen bedeckten Oberflächen durchgeführt. Seifert hat Beugungsexperimente an  $\text{SiO}/\text{Mo}(112)$  [108] durchgeführt und dabei entscheidende Anhaltspunkte zu Klärung der Struktur des Adsorbats gefunden. In anderen Untersuchungen haben Grundmann et al. [15, 45] die Adsorbatstrukturen  $\text{p}(2\times 1)\text{O}/\text{Ni}(110)$  und  $\text{p}(3\times 1)\text{O}/\text{Ni}(110)$  [43, 74] untersucht und auch dort die entsprechenden Strukturvorschläge [9, 14, 28, 73] verifizieren können.

### 3.5 Streuung von schnellen Neonatomen an MgO(001)

MgO ist ein Ionenkristall und die Ionen sind im Festkörper zweifach geladen[71]. Die  $O^{2-}$ -Kationen sind nur innerhalb der Umgebung des Kristallgitters stabil und werden als freie Ionen nicht beobachtet. Es ist aber möglich, dass die O-Ionen in der Nähe der Oberfläche nur einfach geladen sind. Theoretische Studien zeigen aber, dass sich die Eigenschaften der  $O^{2-}$ -Ionen der MgO(001)-Oberfläche von den Eigenschaften im Festkörper nur gering unterscheiden [20, 34, 114].

An der (001)-Oberfläche von Magnesiumoxid wurden neutrale Neon Atome gestreut und die Streuwinkelverteilungen mit auf der Grundlage verschiedener Potentiale berechneten Streuwinkelverteilungen verglichen.

In Abb. 3.12 ist links ein experimentell ermitteltes Streubild für die Streuung von  $Ne^0$  (4,0 keV) an MgO(001) entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Richtung gezeigt. Diese 2D-Plots wurden mit einem positionsempfindlichen Microchannel-Plate-Detektor (Channelplate) aufgenommen [93]. Die Farben geben die Intensität der an diese Stelle auf dem Channelplate gestreuten Projektile an, blau bedeutet keine oder geringe und rot hohe Intensität. Die Streugeometrie kann anhand von Abb. 3.9 nachvollzogen werden.

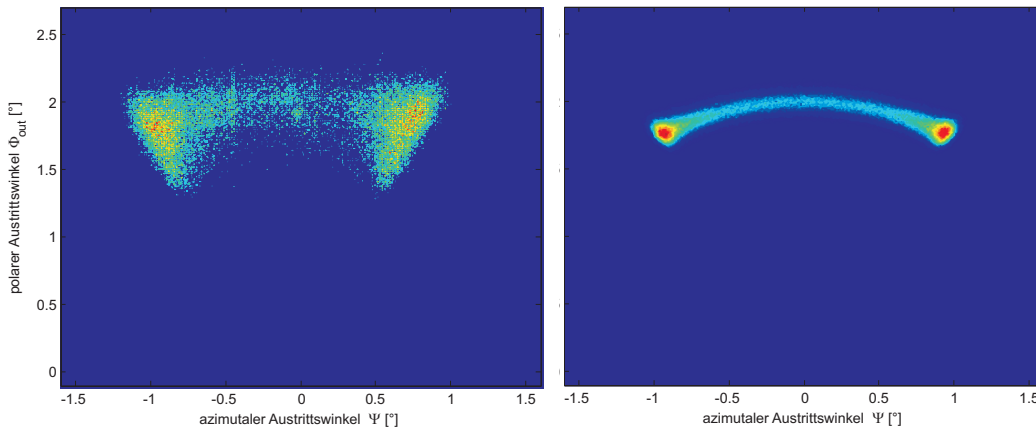


Abb. 3.12: Streuung von Ne (4,0 keV) an MgO(001) entlang einer  $\langle 100 \rangle$ -Richtung, Farbskala: blau - keine Intensität, rot - hohe Intensität, links: Experiment, rechts: Simulation

Im Gegensatz zu den sonst in dieser Arbeit gezeigten „Random“-Streuverteilungen sind in Abb. 3.12 jeweils zwei Maxima sichtbar. Diese Streuverteilungen entlang einer niedrig indizierten  $\langle 100 \rangle$ -Richtung können durch

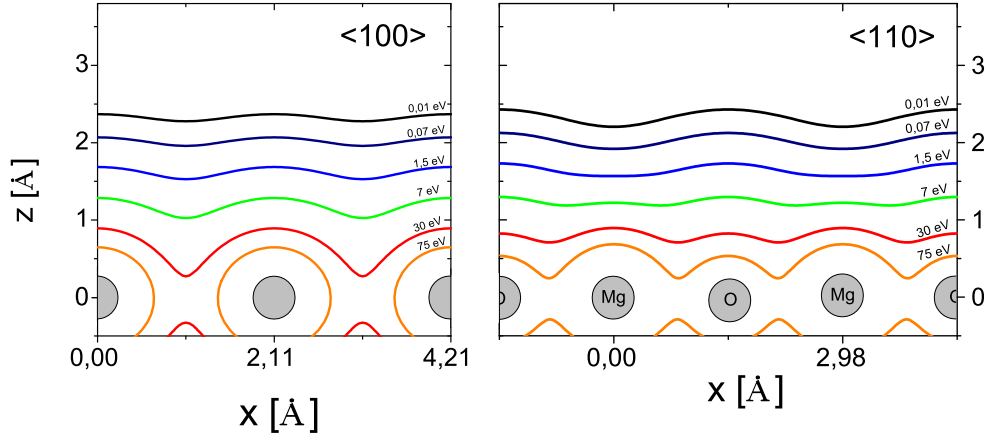


Abb. 3.13: Äquipotentiallinien Ne an MgO links:  $\langle 100 \rangle$ -Richtung, rechts:  $\langle 110 \rangle$ -Richtung

Regenbogenstreuung an den korrigierten Äquipotentialflächen des Projektil-Target-Wechselwirkungspotentials erklärt werden [59, 105]. In Abb. 3.13 (links) sind Äquipotentiallinien für das axial gemittelte Wechselwirkungspotential von  $\text{Ne}^0$ -Projektilen mit den  $\langle 100 \rangle$ -Atomketten der  $\text{MgO}(001)$ -Oberfläche dargestellt. Die in Abb. 3.13 dargestellten Äquipotentiallinien ergeben sich dabei als die senkrechten Schnittflächen der einander überlagerten  $\langle 100 \rangle$ -Zylinderpotentiale [42]. Entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Atomketten wechseln Magnesium- und Sauerstoff-Atome, deshalb sind sie in Abb. 3.13 nicht bezeichnet. Nur für Trajektorien, die exakt zwischen den Atomketten oder genau auf einer Atomkette verlaufen, würden die Projektile so gestreut, dass in Abb. 3.12 ein zentrales Maximum wie für die „Random“-Streuverteilungen entstehen würde. Das zentrale Maximum in Abb. 3.14 tritt erst bei höheren Senkrechtereignissen auf. Die Entstehung des zentralen Maximums hat ihre Ursache in einer Doppelstreuung der Projektile an den Äquipotentialflächen. Damit diese Doppelstreuung auftreten kann, müssen die Äquipotentialflächen ausreichend korrigiert sein. Weil dies für kleine Senkrechtereignisse nicht der Fall ist, tritt dieses mittlere Maximum bei kleinen Senkrechtereignissen nicht auf.

Die in den Abb. 3.12 und 3.14 in den rechten Grafiken dargestellten simulierten Streuverteilungen wurden durch eine dreidimensionale Trajektorien-simulation gewonnen. Auf das Computerprogramm wird in Kapitel 4.2 genauer eingegangen. Für die Simulation der Streuung von  $\text{Ne}^0$  an  $\text{MgO}(001)$  wurden individuelle Wechselwirkungspotentiale von Gärtner (Universität Jena)

benutzt [46].

$$U(r) = \frac{Z_1 Z_2}{r} \sum_{i=1}^4 a_i e^{-b_i r} \quad (3.6)$$

Dabei sind  $Z_1$  und  $Z_2$  die beiden Kernladungen und  $r$  der Abstand in a.u. Die entsprechenden Parameter  $a_i$  und  $b_i$  wurden durch Anpassung an ein individuelles Wechselwirkungspotential von Gärtner gewonnen und sind in folgender Tabelle dargestellt:

Ne-Mg <sup>2+</sup>	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>
	9.33261	-8.77619	2.32577	-0.04891
	b <sub>1</sub>	b <sub>2</sub>	b <sub>3</sub>	b <sub>4</sub>
	4.79570305	3.922491567	2.465604813	1.795364369
Ne-O <sup>2-</sup>	a <sub>1</sub>	a <sub>2</sub>	a <sub>3</sub>	a <sub>4</sub>
	-6.10149	5.71275	6.57901	-3.06936
	b <sub>1</sub>	b <sub>2</sub>	b <sub>3</sub>	b <sub>4</sub>
	2.234137623	3.420557551	1.675378636	1.550796334

Die wesentlichen Eigenschaften der experimentell ermittelten Streuverteilungen werden in den Simulationen wiedergegeben. Die Maxima der Regenbogenstreuung treten beim richtigen Winkel auf und auch das zentrale, auf Doppelstreuung zurückzuführende Maximum, erscheint ab der richtigen Senkrechtereignie. In den Rechnungen sind die Strukturen zu scharf wiedergegeben. Das ist zum einen auf den im Experiment nicht perfekten Kristall zurückzuführen. Desweiteren führen Streuungen an Stufenkanten zu breiteren Strukturen in den Streuverteilungen und werden in den Rechnungen nicht berücksichtigt. Ein wesentlicher Anteil an der Breite der Maxima in den Streuverteilungen wurde aber durch die thermischen Schwingungen in den Simulationen berücksichtigt. Die Projektile streuen an aus der idealen Position ausgelenkten Atomen. Diese Schwingungen sind in den Simulationen mittels des Hochtemperaturlimes des Debye-Modells berücksichtigt worden [8, 48, 83, 120, 122]. Als Debyetemperatur wurde  $\Theta_D=945\text{K}$  angenommen [77]. Die Strukturen in den simulierten Streuverteilungen sind trotz dieser Berücksichtigung wesentlich schärfer, als sie experimentell nachgewiesen wurden.

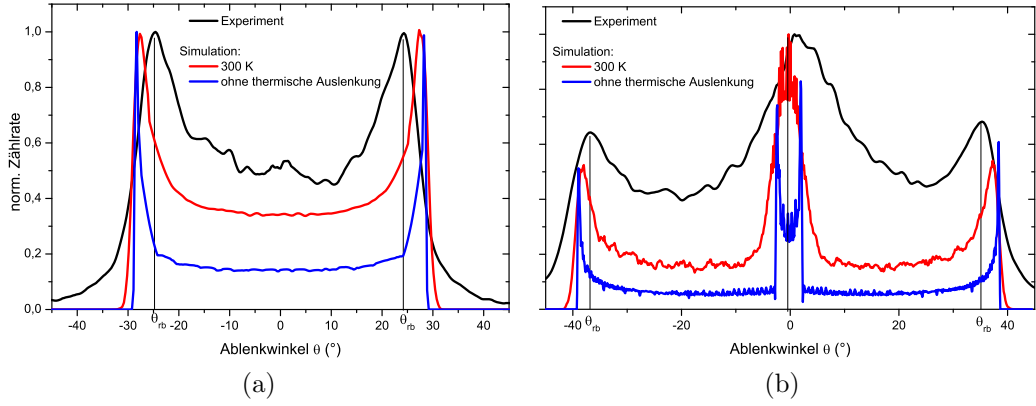


Abb. 3.15: normierte Intensität der gestreuten Ne-Projektile in Abhängigkeit vom Ablenkwinkel  $\theta$  bei der Streuung von  $\text{Ne}^0$  entlang  $\langle 100 \rangle$  an  $\text{MgO}(001)$ , a)  $E_0=4,0$  keV, b)  $E_0=16,0$  keV

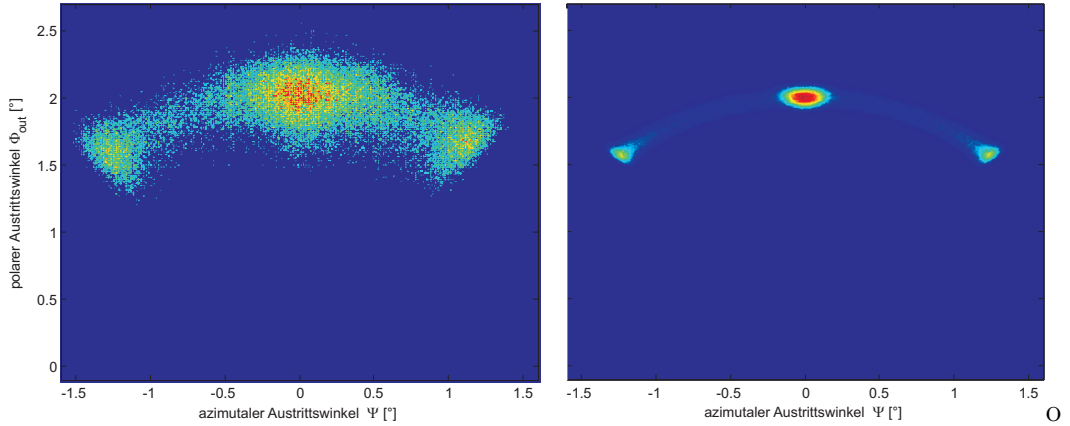


Abb. 3.14: Verteilung der gestreuten Projektile bei der Streuung von Ne (16,0 keV) an  $\langle 100 \rangle$ -MgO, links: Experiment, rechts: Simulation

Um die Übereinstimmung der Positionen der Maxima zwischen den experimentellen und den simulierten Kurven noch deutlicher zu machen, sind in Abb. 3.15 die Projektionen der Intensität auf einen Kreis (rot in Abb. 3.9) um den (nicht dargestellten) Auftreffort eines imaginären, unter  $\phi_{\text{in}}=0^\circ$  gestreuten, Strahls dargestellt. Die Intensität der gestreuten Projektile ist somit als Funktion des Ablenkwinkels  $\theta$  (in Bezug auf den „Random“-gestreuten Strahl) dargestellt. Aus diesen Auftragungen läßt sich direkt der Regenbogenwinkel  $\theta_{rb}$  ablesen.

In Abb. 3.15 sind auch die Projektionen für die am Target ohne Temperatursauslenkung der Atome (blaue Kurve) simulierten Projektile aufge-



tragen. Weil die Maxima für diese Rechnungen so scharf sind, dass in den 2-dimensionalen Plots nur wenige Punkte zu erkennen wären, wurde auf eine Darstellung der Ergebnisse der Simulationen für den Kristall ohne Temperatursauslenkung der Targetatome in den 2-dimensionalen Plots verzichtet. In den Projektionen zeigen sich kleine Differenzen für die Simulationen am Target ohne thermische Auslenkungen und am Target mit 300 K. Die Struktur aus zwei Maxima innerhalb des zentralen Maximums in (b) wird nur für die Streuung am Target ohne Temperatursauslenkung der Atome aufgelöst und die Regenbogenwinkel  $\theta_{rb}$  sind für die Streuung an thermisch ausgelenkten Atomen etwa  $2^\circ$  kleiner. Diese Verschiebung der Regenbogenwinkel wurde von Danailov et al. für die Streuung von He und Xe an Cu(111) gezeigt [25]. Für die He Streuung entlang verschiedener Richtungen von Al(100) wurde dieser Effekt von Wethekam et al. diskutiert [119].

Die Ergebnisse weiterer Messungen und Simulationen sind in Abb. 3.16 dargestellt. Die blauen Symbole repräsentieren Messungen mit verschiedenen Einfallswinkeln und Ne-Projektilenergien entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Richtung. Aufgetragen wurde der Regenbogenwinkel  $\theta_{rb}$  als Funktion der Senkrechterenergie  $E_\perp$ . Die blaue durchgezogene Kurve ist das Ergebnis der Trajektorienimulationen unter Berücksichtigung der thermisch induzierten Schwingungen der Targetatome. Für die blaue gepunktete Kurve wurden Simulationen ohne thermische Auslenkungen der Targetatome ausgewertet. Diese blaue gepunktete Kurve entspricht dem, was Schüller et al. in einer zweidimensionalen Simulation für die Regenbogenwinkel berechnen [101, 123]. Die Übereinstimmung der experimentell ermittelten Regenbogenwinkel für die Streuung von Ne an MgO(001) mit den für den Kristall bei Raumtemperatur simulierten Regenbogenwinkeln ist sehr gut.

In Abb. 3.16 sind zusätzlich die experimentellen und die berechneten Regenbogenwinkel  $\theta_{rb}$  für die Streuung von Ne<sup>0</sup> entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung von MgO(001) dargestellt. In dieser Kristallrichtung wechseln sich die Magnesium- und die Sauerstoff-Atome nicht wie in der  $\langle 100 \rangle$ -Richtung entlang der Ketten ab. Bei der Streuung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung wird das Projektil entlang von sich einander abwechselnden Magnesium- bzw. Sauerstoff-Atomketten gestreut. In Abb. 3.13 (rechts) ist das verdeutlicht. Die Äquipotentiallinien des Potentials für die Streuung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung sind anders korrigiert als in der  $\langle 100 \rangle$ -Richtung. Für die  $\langle 100 \rangle$ -Richtung gibt es auf halber Breite eines Symmetrieabstandes, das ist in dieser Richtung der Abstand der gemischten Ketten, ein Minimum des Potentials. Diese Geometrie führt zu den in Abb. 3.12 und Abb. 3.14 gezeigten Streuverteilungen. Ein zentrales Minimum entsteht für die Streuung entlang der  $\langle 100 \rangle$ -Richtung nur für die Fälle, wo die Projektile genau auf oder genau zwischen den Ketten gestreut werden. Der Stoßparameter für diese Streuprozesse ist 0 bzw. 2,11

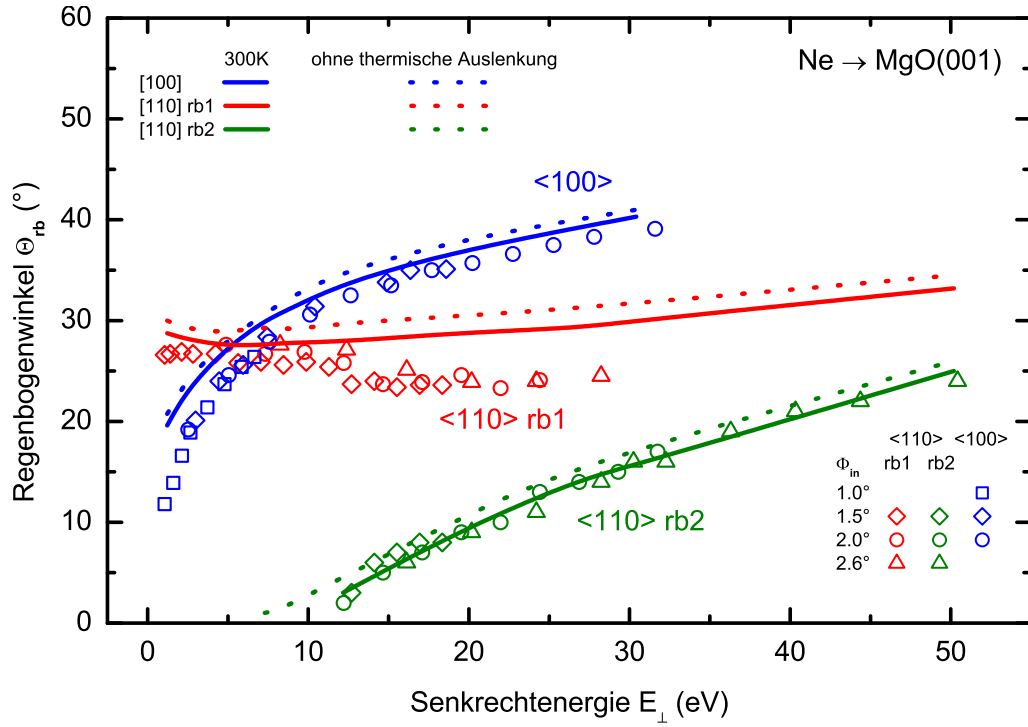


Abb. 3.16: Regenbogenwinkel für die Streuung von Ne an MgO entlang der Richtungen  $\langle 100 \rangle$  (blaue Kurve) und  $\langle 110 \rangle$ , als Funktion der Senkrechtenergie  $E_{\perp}$ , rb1 - innerer (rote Kurve) und rb2 - äußerer (grüne Kurve) Regenbogen für die Streuung entlang  $\langle 110 \rangle$ , Vergleich der experimentellen (Symbole) mit den berechneten Daten (Kurven)

$\text{\AA} / 2 = 1,06 \text{ \AA}$  (vgl. Abb. 3.13 links).

Bei der Streuung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung gibt es, abhängig von der Senkrechtenergie, auf der Breite eines Symmetrieabstandes (Abstand zweier gleicher Ketten) zwei Minima für die Äquipotentiallinien des Potentials (vgl. Abb. 3.13 rechts). Der Abbildung kann man entnehmen, dass ab etwa  $E_{\perp} = 7 \text{ eV}$  (grüne Linie) die Äquipotentiallinien zwei Minima aufweisen. Für kleinere Energien (dunkelblau, schwarz) haben die Äquipotentiallinien nur ein Minimum innerhalb des Symmetrieabstandes. Die Folge dieses, im Vergleich zur  $\langle 100 \rangle$ -Richtung doppelt korrigierten, Potentials läßt sich in den Streuverteilungen für die Streuung entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung in Abb. 3.17 studieren. Bei der Senkrechtenergie  $E_{\perp} = 7 \text{ eV}$  ist außer den beiden äußeren Regenbogenmaxima ein zentrales Maximum zu sehen. Dieses zentrale Maximum spaltet bei  $E_{\perp} = 19,5 \text{ eV}$  in zwei deutlich getrennte innere Regenbogenmaxima auf, während der Wert für die äußeren Maxima fast konstant bleibt. Bei der höchsten dargestellten Senkrechtenergie ( $E_{\perp} = 26,8 \text{ eV}$ ) sind

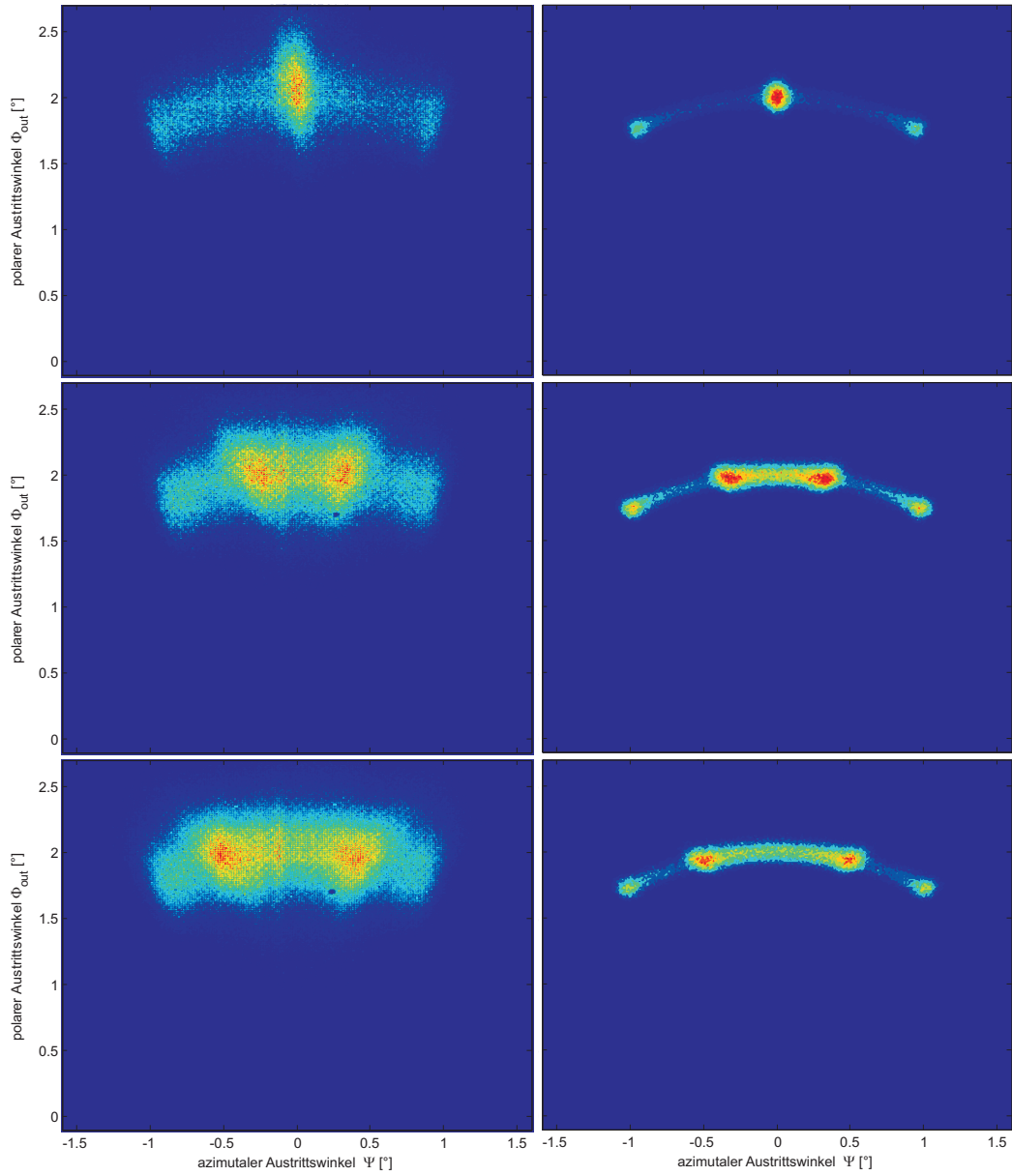


Abb. 3.17: Streuverteilungen für die Streuung von Ne an MgO(001) entlang der  $\langle 110 \rangle$ -Richtung,  $\phi_{\text{in}}=2.0^\circ$ , links: Experiment rechts: Simulation, oben:  $E_{\perp}=7.3$  eV, Mitte:  $E_{\perp}=19.5$  eV, unten:  $E_{\perp}=26.8$  eV

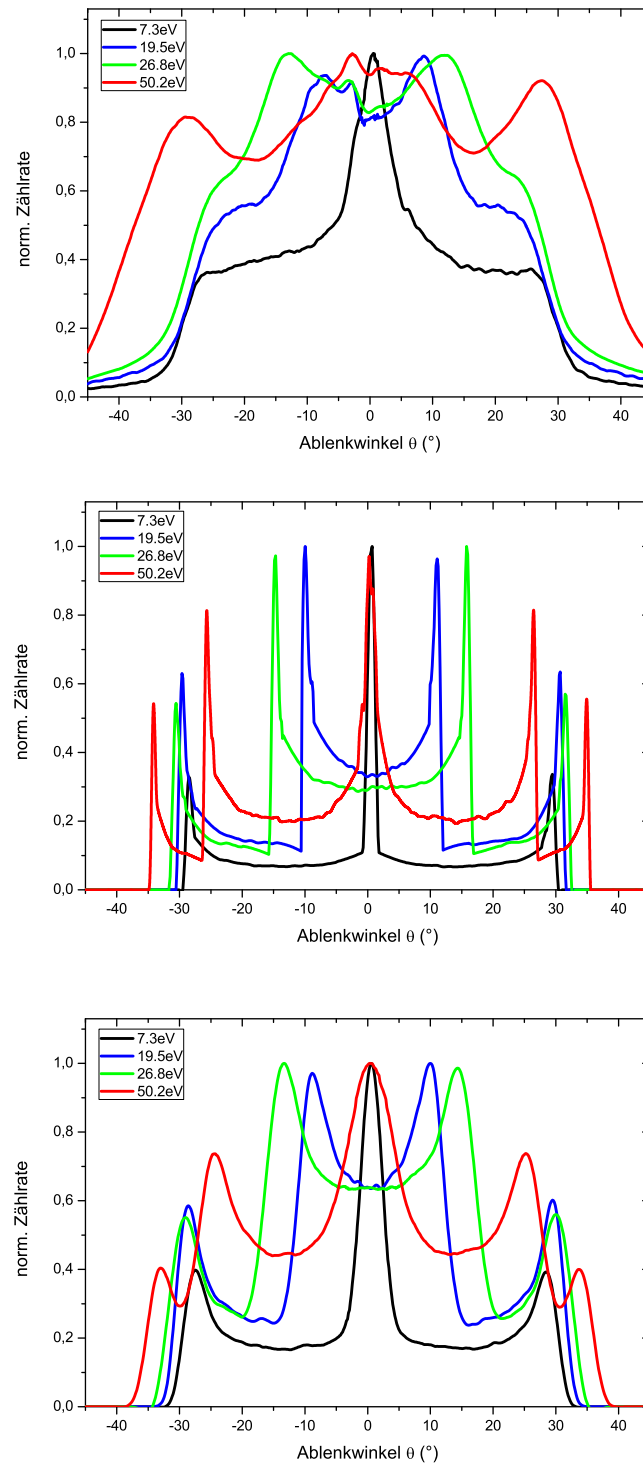


Abb. 3.18: Projektion der Streuverteilungen für die Streuung Ne an MgO(001) entlang  $\langle 110 \rangle$ , Senkrechtenergie  $E_{\perp} = 7.3$  eV (schwarze Kurve),  $E_{\perp} = 19.5$  eV (blaue Kurve),  $E_{\perp} = 26.8$  eV (grüne Kurve),  $E_{\perp} = 50.2$  eV (rote Kurve), oben: Experiment, Mitte: Simulation ohne thermische Auslenkung, unten: Simulation 300K

in den experimentellen Daten die inneren und die äußeren Regenbogenpeaks schon fast nicht mehr voneinander zu unterscheiden. In der Simulation erkennt man, dass die inneren Maxima weiter auseinander driften, während die äußeren Maxima sich fast nicht verändert haben.

In Abb. 3.18 sind Schnitte durch die in Abb. 3.17 vorgestellten Streuverteilungen gezeigt. Zusätzlich dazu wurden Schnitte für die Streuung bei  $E_{\perp}=50,2$  eV und die Ergebnisse zu den Simulationen am kalten Target (unten) dargestellt. Den Darstellungen lässt sich eine gute quantitative Übereinstimmung der simulierten Daten mit den experimentellen Ergebnissen entnehmen: Die Maxima treten bei der richtigen Senkrechterenergie auf und die Entwicklung der Regenbogenwinkel zeigt die richtige Tendenz. Eine quantitative Übereinstimmung der Werte ist für die  $\langle 110 \rangle$ -Richtung nur bedingt gegeben.

Die Simulationen wurden auch mit anderen Potentialen als dem individuellen Wechselwirkungspotential für  $\text{Ne-MgMg}^{2+}$  und  $\text{Ne-MgO}^{2-}$  von Gärtner durchgeführt [46, 71]. Die mit dem universellen ZBL-Potential [128] berechneten Regenbogenwinkel  $\theta_{rb}$  weichen stärker als die in Abb. 3.16 gezeigt von den experimentellen Werten ab. Bei Verwendung eines individuellen Wechselwirkungspotentials für  $\text{Ne-Mg}^0$  und  $\text{Ne-MgO}^0$  wird der innere Regenbogenwinkel  $\theta_{rb1}$  unterschätzt.



# Kapitel 4

## Untersuchungen an Mo(112) und ultradünnen Filmen auf Mo(112)

### 4.1 Kristallpräparation

In Abb. 4.1 ist die geometrische Struktur der Mo(112)-Oberfläche dargestellt. Die Kristallstruktur von Molybdän ist kubisch raumzentriert (bcc). Die Einheitszelle der (112)-Fläche ist ein Rechteck (gelb in Abb. 4.1 links). Abweichend zur ähnlichen (011)-Fläche einer kubisch flächenzentrierten Kristallstruktur (fcc) befindet sich das Molybdän-Atom in der zweiten Ebene nicht in der geometrischen Mitte der Einheitszelle, sondern ist im Fall der bcc - (112) Fläche um  $1/6$  der Einheitszelle aus der Mitte verschoben. Die Einheitszelle ist in Richtung der Oberflächennormalen sechs Netzebenen hoch,

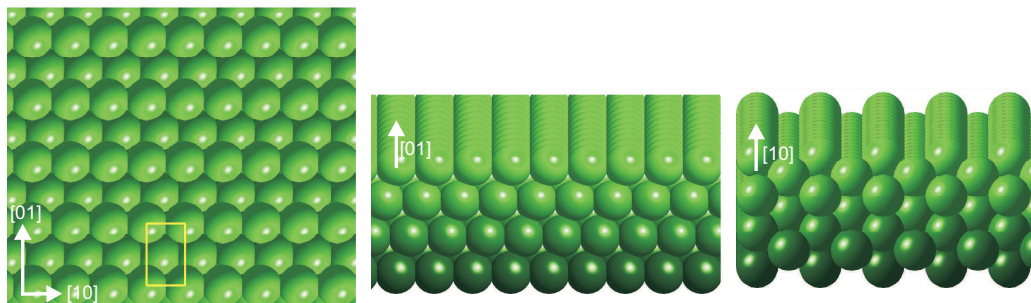


Abb. 4.1: Darstellung der Kristallstruktur von Mo(112) : Draufsicht (links), [01]-Richtung unter  $2^\circ$  (Mitte) und entlang der [10]-Richtung (rechts)

so dass erst die untersten in Abb. 4.1 (Mitte) dargestellten Molybdän-Atome zur nächsten Einheitszelle gehören.

#### 4.1.1 Präparation des sauberen Mo(112)

Der Molybdän-Kristall wird nach dem Einbau in die UHV-Kammer durch mehrere Sputter-/Heizzyklen präpariert. Dafür wird die Oberfläche des Kristalls zunächst mit  $\text{Ar}^+$ -Ionen unter einem Einfallswinkel von  $2^\circ$  beschossen. Anschließend wird der Kristall mittels Elektronenbeschuss für einige Sekunden auf etwa 1900 K erhitzt. Diese Prozesse werden mehrere Male abwechselnd wiederholt. Der Fortschritt der Präparation wird mittels Winkelverteilungen von an der Oberfläche gestreuten Projektilen kontrolliert. In Abb. 4.3 sind solche Streuverteilungen für die Streuung von 25 keV  $\text{H}^0$  unter  $\phi_{\text{in}} \approx 1,4^\circ$  dargestellt. Dies dokumentiert eine gut definierte Oberfläche nach der Präparation.

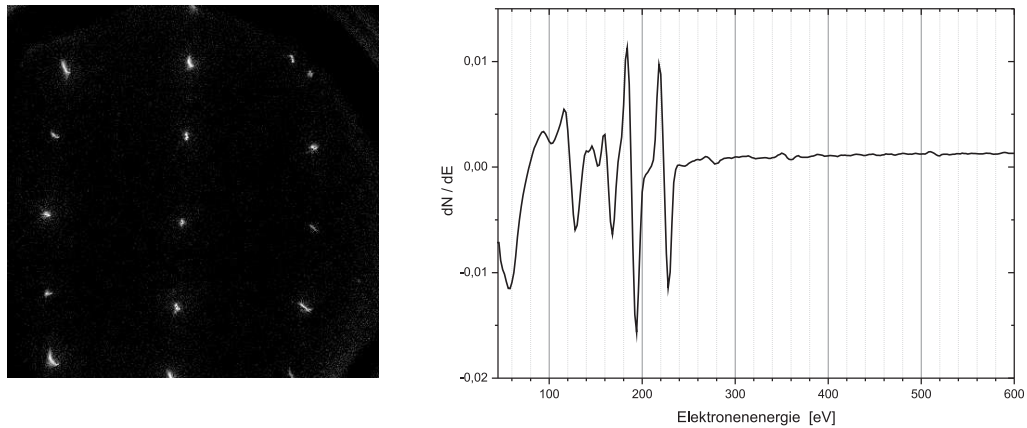


Abb. 4.2: LEED-Aufnahme für  $E_{\text{Elektron}}=51,4$  eV und differenziertes Augerelektronenspektrum ( $E_{\text{Elektron}}=4$  keV) an Mo(112)

Wenn die Oberfläche derart präpariert wurde, können Verunreinigungen (z.B. durch Auftauen der Kühlfalle nach einem Messtag oder auch eine der im folgenden Abschnitt beschriebenen Oxidstrukturen) durch kurzzeitiges Erwärmen des Kristalls auf 1900 K gesäubert werden. Zuvor werden Kohlenstoff-Verunreinigungen durch Zugabe von Sauerstoff bei etwa 900 K entfernt. Zusätzlich kontrolliert wird die Präparation durch Aufnahme von LEED-Bildern und Augerelektronenspektren. Eine typische LEED-Aufnahme ist in Abb. 4.2 (links) dargestellt. Die Beugungsreflexe der Mo(112)-Oberfläche



sind gut zu erkennen, ein Untergrund zwischen den Spots ist nur schwach ausgeprägt. Das in Abb. 4.2 (rechts) dargestellte Augerelektronenspektrum zeigt ein sehr sauberes Spektrum für Molybdän. Verunreinigungen durch Kohlenstoff ( $E=271$  eV) und Sauerstoff ( $E=512$  eV) sind nur sehr schwach sichtbar.

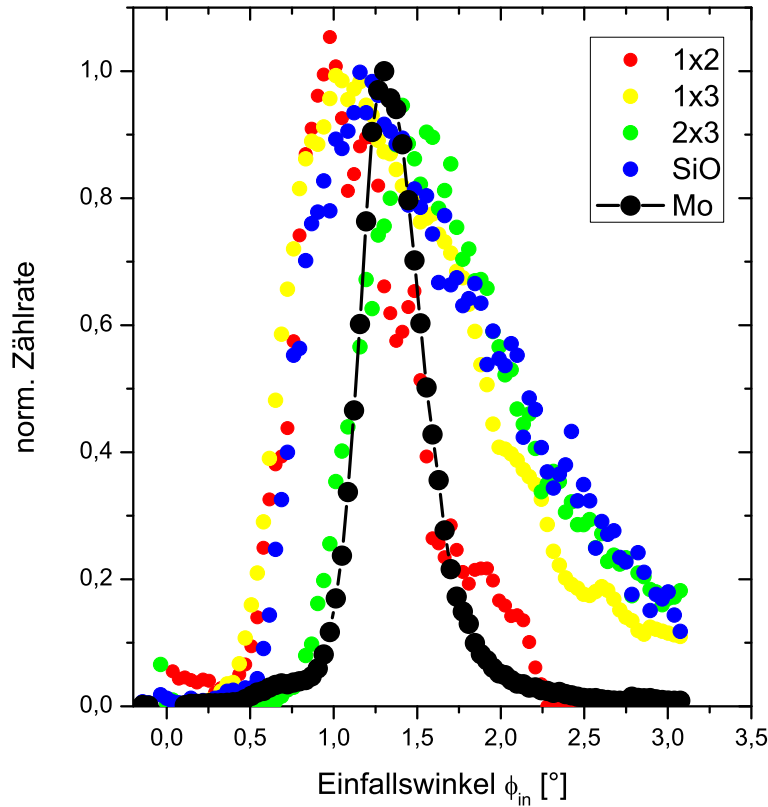


Abb. 4.3: Polare Winkelverteilungen für die Streuung von 25 keV  $H^0$  unter  $\phi_{in} \approx 1,4^\circ$  an Mo(112) (schwarz), den Sauerstoff-Überstrukturen (1x2-rot, 1x3-gelb, 2x3-grün) und SiO/Mo(112) (blau)

#### 4.1.2 Präparation der Sauerstoff-Überstrukturen auf Mo(112) und von SiO/Mo(112)

Auf Mo(112) wurden nach Rezepten von Shaikhutdinov et al. [109] verschiedene Oxidstrukturen durch Einlassen von unterschiedlichen Dosen Sauerstoff in die UHV-Kammer bei verschiedenen Kristalltemperaturen präpariert. Das Wachstum der Oxidstrukturen wurde zunächst mittels AES und LEED über-

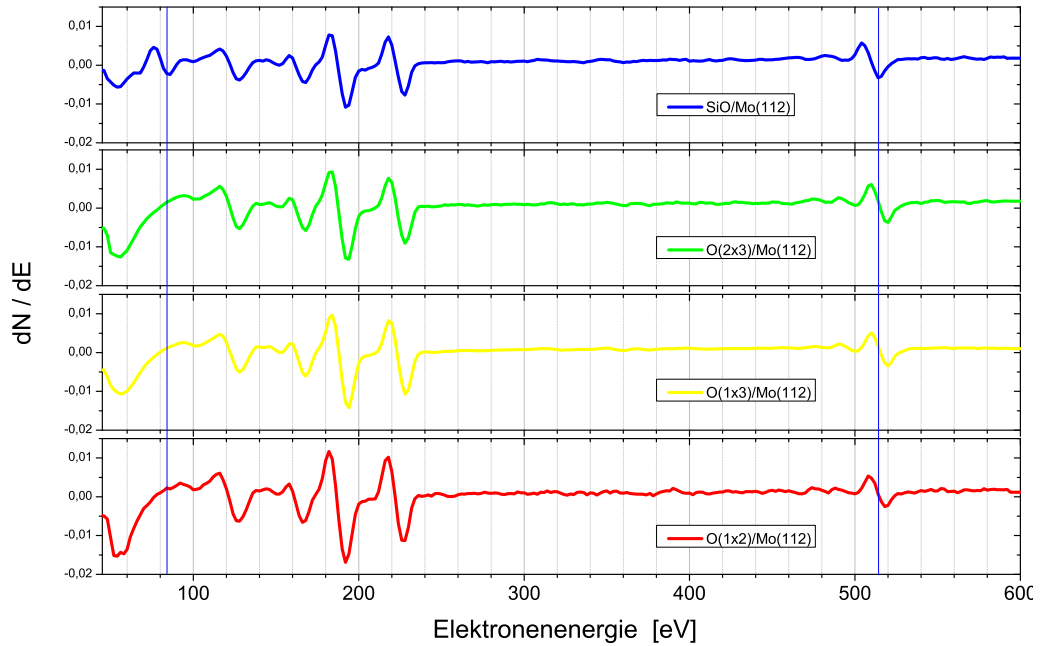


Abb. 4.4: diff. Augerelektronenspektren an p(1x2)O/Mo(112), p(1x3)O/Mo(112), p(2x3)O/Mo(112) und SiO/Mo(112), Elektronenenergie  $E_{\text{Elektron}}=4 \text{ keV}$

prüft. Augerelektronenspektren und LEED-Aufnahmen der in dieser Arbeit verwendeten Oxidstrukturen sind in Abb. 4.4 und Abb. 4.5 dargestellt.

An diesen Oxidoberflächen aufgenommene polare Winkelverteilungen der gestreuten Projektile zeigen (s. Abb. 4.3), dass die p(1x2)O/Mo(112)- und auch die p(1x3)O/Mo(112)-Struktur größere Defektstrukturen haben, als die p(2x3)O/Mo(112)-Struktur.

Für die Präparation des c(2x2)- SiO/Mo(112)-Films wurde die Mo(112)-Oberfläche zunächst bei 900K und bei einem Sauerstoffpartialdruck  $1 \cdot 10^{-9}$  mbar  $\text{O}_2$  für 300 s oxidiert. Dann wurden 1,2 L Silizium unter den gleichen Bedingungen auf die Fläche aufgedampft und der Film anschließend bei 1250 K für 300 s ausgeheilt.

In Abb. 4.3 wird eine polare Winkelverteilung der am c(2x2)-SiO/ Mo(112)-Film gestreuten  $\text{He}^0$ -Projektile gezeigt. Die bei der Streuung am SiO/ Mo(112)-Film gemessene Winkelverteilung ist, wie die Winkelverteilungen der an den Oxidstrukturen gestreuten Projektile, wesentlich breiter als jene, die bei der Streuung am sauberen Mo(112) aufgenommen wurde. Die Qualität der Oberfläche hat sich, im Vergleich zur sauberen Mo(112)-Oberfläche, durch die Präparation des SiO/Mo(112)-Films also verschlechtert. Das Augerelektronenspektrum in Abb. 4.4 zeigt den Si-Auger-Peak bei 70 eV und die um 5 eV

verschobene  $O_{KLL}$ - Linie.

In der folgenden Tabelle sind die Rezepte zur Präparation der verschiedenen dünnen Filme auf Mo(112) zusammengestellt.

	oxidieren	ausheilen der p(2x3), 300 s
p(1x2) II	600°C, p=1,5·10 <sup>-8</sup> mbar für 80 s	1200 °C
p(2x1)	600°C, p=3·10 <sup>-8</sup> mbar für 80 s	1150 °C
c(4x2)	600°C, p=4,5·10 <sup>-8</sup> mbar für 80 s	1050 °C
p(1x2)	600°C, p=7·10 <sup>-8</sup> mbar für 80 s	575 °C
p(1x3)	600°C, p=4,5·10 <sup>-7</sup> mbar für 80 s	400 °C
p(2x3)	600°C, p=2·10 <sup>-6</sup> mbar für 80 s	-
SiO	600 °C, p=1·10 <sup>-9</sup> mbar für 300 s	
	+ aufdampfen 1,2 L Si bei 600 °C, p=1·10 <sup>-9</sup> mbar	
	+ auskeilen 950 °C, 300s	

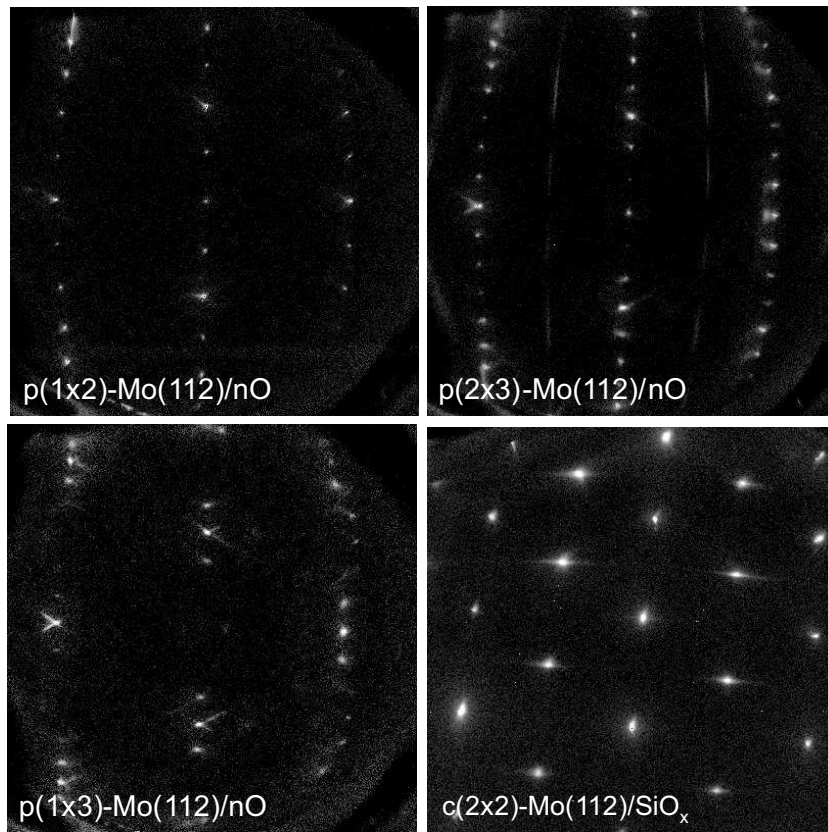


Abb. 4.5: LEED-Aufnahmen an  $p(1 \times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$ ,  $p(1 \times 3)\text{O}/\text{Mo}(112)$ ,  $p(2 \times 3)\text{O}/\text{Mo}(112)$  und  $\text{SiO}/\text{Mo}(112)$ ,  $E_{\text{Elektron}} = 51,4 \text{ eV}$

## 4.2 Strukturuntersuchungen mittels azimuthal aufgelöster Elektronenemission

Ausgangspunkt für die Untersuchungen an den verschiedenen Überstrukturen auf Mo(112) waren konkurrierende Modelle für den SiO-Film auf Mo(112). Das Cluster-Modell beschreibt den Film durch rautefförmig angeordnete und vierfach durch Sauerstoff koordinierte Silizium-Atome [22]. Im 2D-Netzwerk-Modell sind jeweils sechs Silizium-Atome als Ring zu einem Netzwerk verbunden [111].

Die Ionenstrahltriangulationskurve für SiO auf Mo(112) zeigt, dass die rechteckige Symmetrie der Ionenstrahltriangulationskurve von Mo(112) erhalten bleibt aber die [21] und die [41]- Richtung unterdrückt sind (s. Abb.

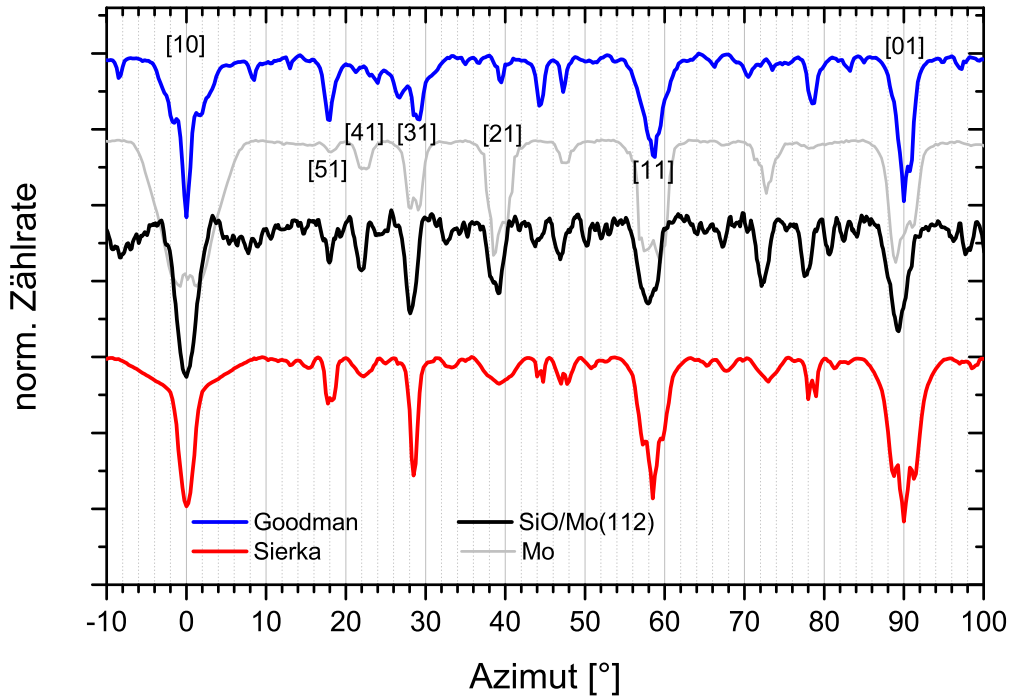


Abb. 4.6: Ionenstrahltriangulation für die Streuung von 25keV  $H^0$  unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} \approx 1,1^\circ$  an SiO/Mo(112), Darstellung der simulierten Ionenstrahltriangulationskurven für die beiden konkurrierenden Modelle für den SiO-Film von Goodman et al. (blaue Kurve) und Sierka et al. (rote Kurve), Vergleich mit den experimentellen Daten für SiO/Mo(112) (schwarze Kurve) und Mo(112) (graue Kurve)

4.6). Es treten keine zusätzlichen Peaks auf, die Symmetrie der Ionenstrahltriangulationskurve läßt auf eine rechtwinkelige Einheitszelle schließen. Das von Sierka et al. vorgeschlagene 2D-Netzwerk-Modell zeigt eine solche rechtwinkelige Symmetrie. Hingegen ist die rautenförmige Symmetrie des von Goodman et al. vorgeschlagenen Cluster-Modells hexagonal. Computersimulationen zeigen eine gute Übereinstimmung der experimentellen Daten der Ionentriangulation mit dem Modell von Sierka et al. [106].

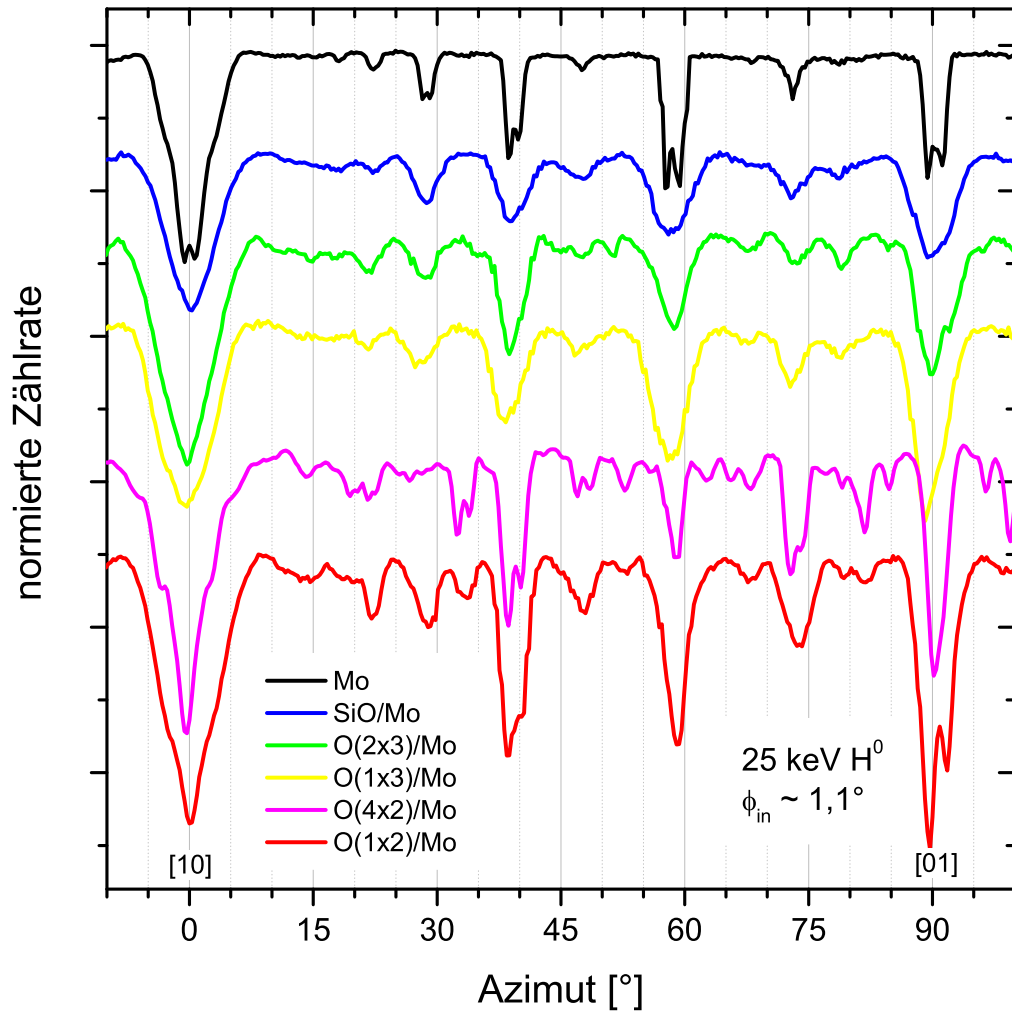


Abb. 4.7: Ionenstrahltriangulation für die Streuung von 25 keV  $H^0$  unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} \approx 1,1^\circ$  an Mo(112) und den verschiedenen Oxidstrukturen

In Abb. 4.7 sind beispielhaft die experimentellen Daten für die Streuung von 25 keV  $H^0$  unter  $\phi_{in} \approx 1,1^\circ$  an den verschiedenen Substraten auf Mo(112) im Vergleich zur Streuung am sauberen Mo(112) dargestellt. Es zeigen sich

deutliche Unterschiede in den Ionenstrahltriangulationskurven für die Oxidstrukturen. Auf den ersten Blick auffällig sind die deutlicheren Strukturen für die kleineren Maxima in den an den Überstrukturen gemessenen Kurven. Die Projektile dringen unter den gleichen Bedingungen offensichtlich tiefer in den Kristall ein als bei der Streuung am sauberen Mo(112) - Kristall. Das zeigt sich auch besonders deutlich in der Breite der Peaks der Richtungen [10] und des [01]. Diese Minima sind in den an den Oxidstrukturen gemessenen Ionenstrahltriangulationskurven viel breiter als bei sauberem Mo(112). Außerdem verändert sich die Rangfolge der Peakhöhen, zusätzliche große Peaks treten jedoch nicht auf.

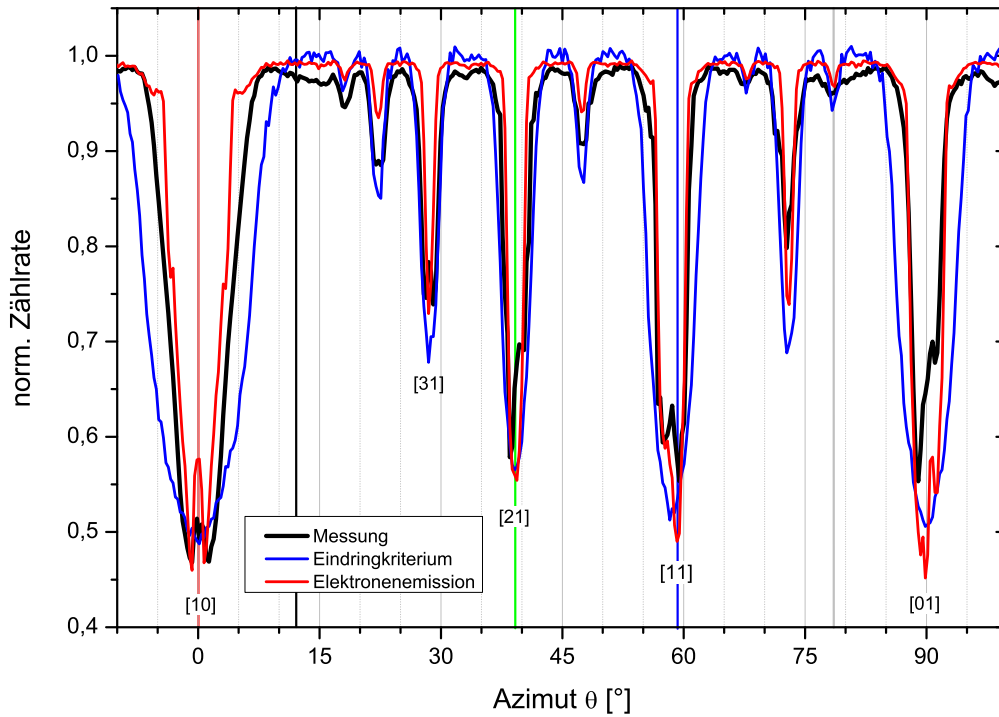


Abb. 4.8: Ionenstrahltriangulation für die Streuung von 25keV  $H^0$  an Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 1,5^\circ$

In Abb. 4.8 ist die am sauberen Mo(112) gemessene Ionenstrahltriangulationskurve dargestellt und die für diesen Kristall simulierten Ionenstrahltriangulationskurven eingezeichnet. Die Rechnungen sind klassische Trajektorien-simulationen [119], d.h. entlang der Trajektorie des Projektils wird numerisch die Bewegungsgleichung für das Projektil mit der Masse  $M_P$  mittels

eines Runge-Kutter-Verfahrens 4. Ordnung gelöst [88]:

$$M_P \ddot{\vec{r}} = -\vec{\nabla} U(\vec{r}) \quad . \quad (4.1)$$

Dabei ist  $U$  eine Überlagerung von geschirmten interatomaren Wechselwirkungspotentialen  $V_i$ :

$$V_i(\vec{r}) = \frac{Z_1 Z_2}{|\vec{r} - \vec{r}_i|} f\left(\frac{|\vec{r} - \vec{r}_i|}{a}\right) \quad . \quad (4.2)$$

Als Potential wird das durch O'Connor und Biersack korrigierte Molire-Potential benutzt [75, 78]. Unter dem Projektil wird ein ausreichend großer Bereich gewählt, in dem die Gitterpositionen der Targetatome zunächst fest nach der jeweiligen Kristallstruktur errechnet werden. Die thermischen Schwingungen werden nach dem Debye-Modell berücksichtigt [27, 54], indem die Debye-Auslenkung  $u$  in allen drei Raumrichtungen unkorreliert mit Gauß-Statistik an die jeweilige Gitterposition multipliziert wird.

$$\langle u^2 \rangle = \frac{3 \hbar^2 T}{M_T k_B \Theta_D^2} \quad (4.3)$$

(mit der Targettemperatur  $T$ , der Targetatommasse  $M_T$ , der Boltzmann-Konstante und der Debye-Temperatur  $\Theta_D$ )

Die blaue Kurve in Abb. 4.8 wurde mittels eines Einbruchkriteriums errechnet. Die Prinzipien dieses Verfahrens sind von Bernhard in [8] ausführlich dargestellt worden. Die Projektile dringen in niedrig indizierte Kristallrichtungen tiefer in den Kristall ein als in höher indizierten Richtungen. Dargestellt wird, als Funktion des azimuthalen Winkels, die Anzahl jener Projektile, deren Umkehrpunkt kleiner als ein bestimmter Wert ist ( $z = -0,2$  a.u. in den Simulationen für Abb. 4.8). In Abb. 4.9 sind die Eindringprofile für Projektile, die entlang verschiedener Richtungen eingeschossen wurden, dargestellt. Das schwarz markierte Spektrum ( $\theta = 12^\circ$  in Abb. 4.8) zeigt  $H^0$ -Atome, die entlang einer zufälligen, hochindizierten Richtung gestreut wurden. Man erkennt, dass alle Projektile, die zu dieser Gruppe gehören, ähnliche Trajektorien durchlaufen haben. Die Projektile werden an einer Ebene, die sich etwa 0,7 a.u. vor der Kristalloberfläche befindet, reflektiert. Die anderen Spektren zeigen Eindringprofile von Projektilen, die entlang niedrig indizierter Richtungen gestreut wurden. Die Projektile werden in ihrer Mehrzahl nicht mehr vor der Kristalloberfläche reflektiert, sondern dringen je nach azimuthaler Richtung mehr oder weniger tief in den Kristall ein. Die Strukturen in den Spektren zeigen, in welcher Tiefe im Kristall sich in der jeweiligen Richtung eine Ebene von Atomen befindet. Weil die Einheitszelle des Mo(112)



-Kristalls in der Richtung normal zur Oberfläche nicht nur aus zwei sondern aus sechs Atomlagen besteht, sind diese Ebenen für die verschiedenen Kristallrichtungen nicht gleich. An anderen Kristallen (z.B. NiAl(110)) kann man aus einer entsprechenden Darstellung die Eindringtiefe leicht in Einheiten des Netzebenenabstandes abzählen.

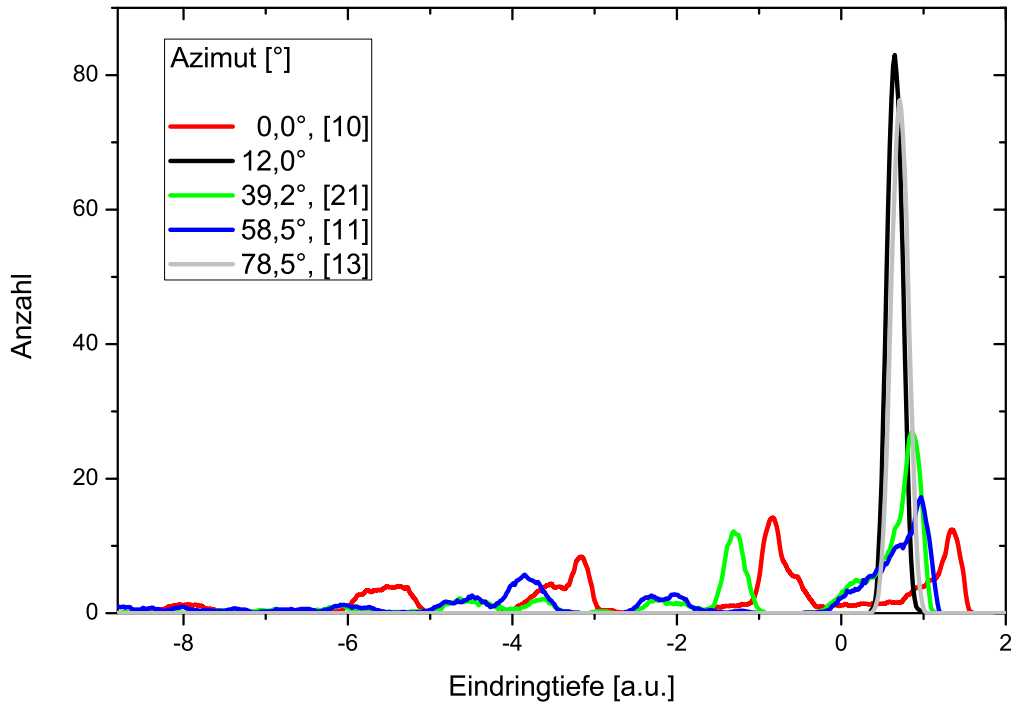


Abb. 4.9: simulierte Eindringtiefe, 25 keV  $H^0$  an Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 1,5^\circ$  entlang verschiedener azimuthaler Richtungen

Ein Problem für die Aussagekraft dieser Simulationen ist, dass in den Experimenten keine Eindringtiefen sondern Elektronenzahlspektren aufgenommen werden. In Abb. 4.11 sind solche Elektronenzahlspektren (s. Kap. 2.3.2) für die o.g. Richtungen dargestellt. Ziel der Simulationen war es, solche Spektren zu errechnen. Dafür wurde entlang der Trajektorie eine vom Abstand  $z$  zur Oberfläche und dem Abstand zu Gitteratomen abhängige Elektronenproduktionsrate definiert und in der Simulation aufsummiert. Für jeden Schritt entlang der Trajektorie wird dafür aus der Gesamtwahrscheinlichkeit, die sich aus dem experimentellen Elektronenyield ergibt, eine Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Elektron emittiert wird, definiert.

In Abb. 4.9 sind die simulierten Eindringtiefen der Wasserstoffprojekteile für verschiedene azimuthale Richtungen dargestellt. Die rote Kurve repräsentiert den [10]-Kanal, dieser zeigt in Abb. 4.8 die breiteste Struktur. In Abb.

4.9 erkennt man, dass einige Projektile (etwa 10% ) weniger als in einer hochindizierten Richtung (schwarze Kurve) in den Kristall eindringen, die Mehrzahl der Projektile jedoch bis etwa 1 a.u. in den Festkörper gelangt. Diese Tiefe entspricht der zweiten Mo -Atomlage. Etwa 40% aller Projektile dringen noch tiefer in den Festkörper ein, sie erreichen  $\approx -3$  a.u.,  $\approx -5.5$  a.u. und etwa 5%  $\approx -8$  a.u. Die diskreten Eindringtiefen entsprechen dem doppelten, vierfachen und sechsfachen Netzebenenabstand.

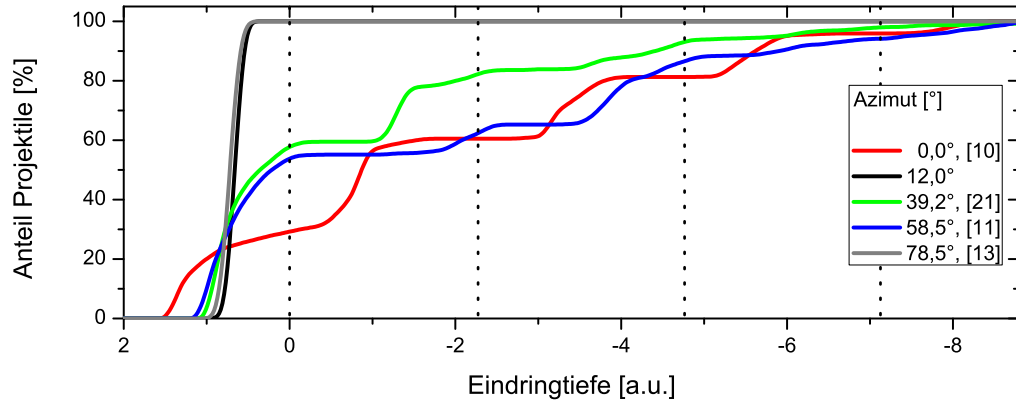


Abb. 4.10: simulierte Eindringtiefe, 25 keV  $H^0$  an Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 1,5^\circ$  entlang verschiedener azimuthaler Richtungen

In Abb. 4.10 ist der Anteil der Projektile dargestellt, welche in eine bestimmte Tiefe in den Kristall eindringen. Aus der Darstellung lässt sich ablesen, bis in welcher Tiefe Projektile eingedrungen sind. Beiden Darstellungen ist zu entnehmen, dass für die Streuung entlang der [13]-Richtung ( $\theta = 78,5^\circ$ , graue Kurve) und entlang der zufälligen, hoch-indizierten Richtung (schwarze Kurve) die Projektile nicht in den Kristall eindringen. In der [11] und der [12] -Richtung ( $\theta = 58,5^\circ$ , blaue Kurve und  $\theta = 39,2^\circ$ , grüne Kurve) dringen mehr Projektile tiefer in den Kristall ein als in den [10]-Kanal, werden dann aber stärker als in diesem von der zweiten Atomlage blockiert.

Da die Elektronenaustrittswahrscheinlichkeit mit der Entfernung des Entstehungsortes von der Kristalloberfläche abnimmt, werden Teile der Trajektorien der Projektile die tiefer als etwa zwei Atomlagen verlaufen nur in geringem Maße zu den gemessenen Elektronenspektren beitragen. Entscheidend ist die Länge der Trajektorie des Projektils im Bereich hoher Elektronendichte und in der Nähe der Oberfläche. Dies kann Abb. 4.9 und Abb. 4.10 nicht entnommen werden. Die Emission von Elektronen ist bei der Streuung entlang der [10]-Richtung auch deshalb wahrscheinlicher, weil Projektile, die an der zweiten Atomlage (entsprechend höhere Elektronendichte als für die

Streuung an der ersten Atomlage) gestreut werden, den Kristall wieder verlassen können, also nicht tiefer in den Kristall eindringen, bis die kinetische Energie aufgebraucht ist. Für diese Atome ist die Trajektorie für die Emission von Elektronen doppelt so lang, wie für Projektile, die z.B. im [12]-Kanal tief in den Kristall eindringen. Auch diese Effekte konnten bei der Simulation der Elektronenzahlspektren studiert werden.

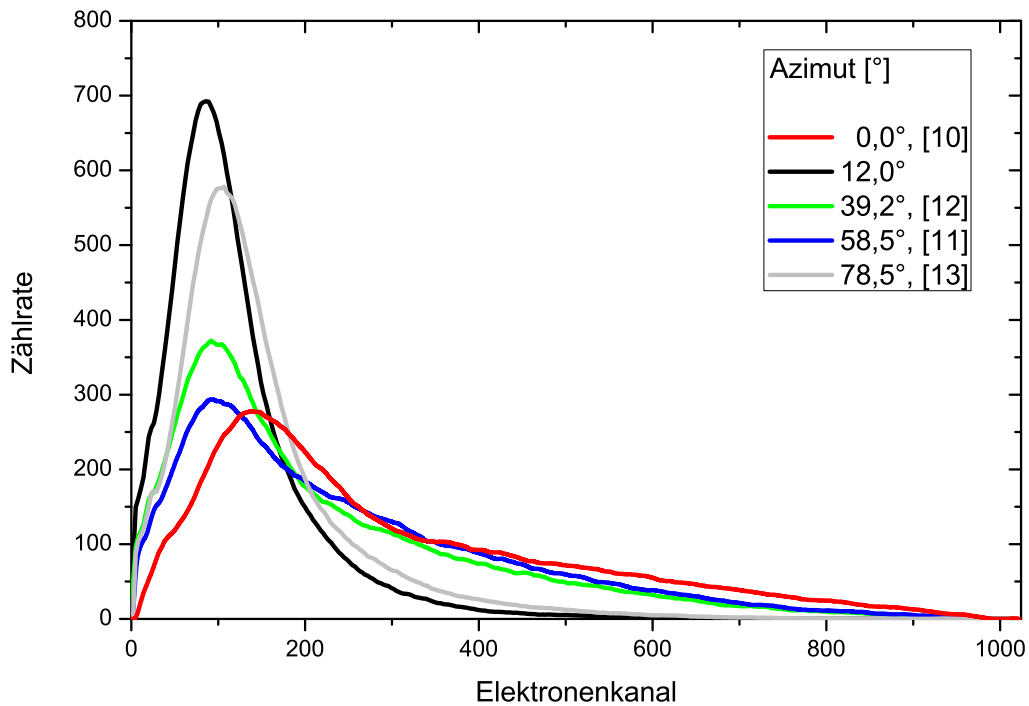


Abb. 4.11: experimentelle Elektronenzahlspektren, 25 keV  $H^0$  an Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 1,5^\circ$  entlang verschiedener azimuthaler Richtungen

In Abb. 4.11 sind die experimentell bei der Streuung von 25 keV  $H^0$  an Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 1,5^\circ$  ermittelten Elektronenzahlspektren für die in Abb. 4.8 markierten azimuthalen Richtungen dargestellt. Bei der Streuung entlang des [10]-Kanals (rote Kurve) werden die meisten Elektronen emittiert. Das Zentrum der Verteilung liegt etwa bei Kanal 150, was etwa 12 pro Projektil ausgelösten Elektronen entspricht. Im Vergleich dazu werden bei der Streuung entlang der hochindizierten Richtung (schwarze Kurve) nur 7 Elektronen ( $\approx$  Kanal 90) emittiert. Für die Streuung entlang der [13]-Richtung verschiebt sich dieses Maximum etwas (8 Elektronen pro Projektil), für die Streuung entlang des [11]- und des [12]-Kanals ändert sich das Maximum im Vergleich zur Streuung entlang der hochindizierten Richtung nicht. Es treten allerdings viele Ereignisse mit der Emission von mehr

als 7 Elektronen pro Projektil auf.

Die berechneten Elektronenzahlspektren sind in Abb. 4.12 dargestellt. Für die von Projektilen ausgelösten Elektronen wurde eine Austrittstiefe von 2,0 a.u. angenommen. Des weiteren wurde berücksichtigt, dass die Projektilen im Festkörper ihre kinetische Energie verlieren.

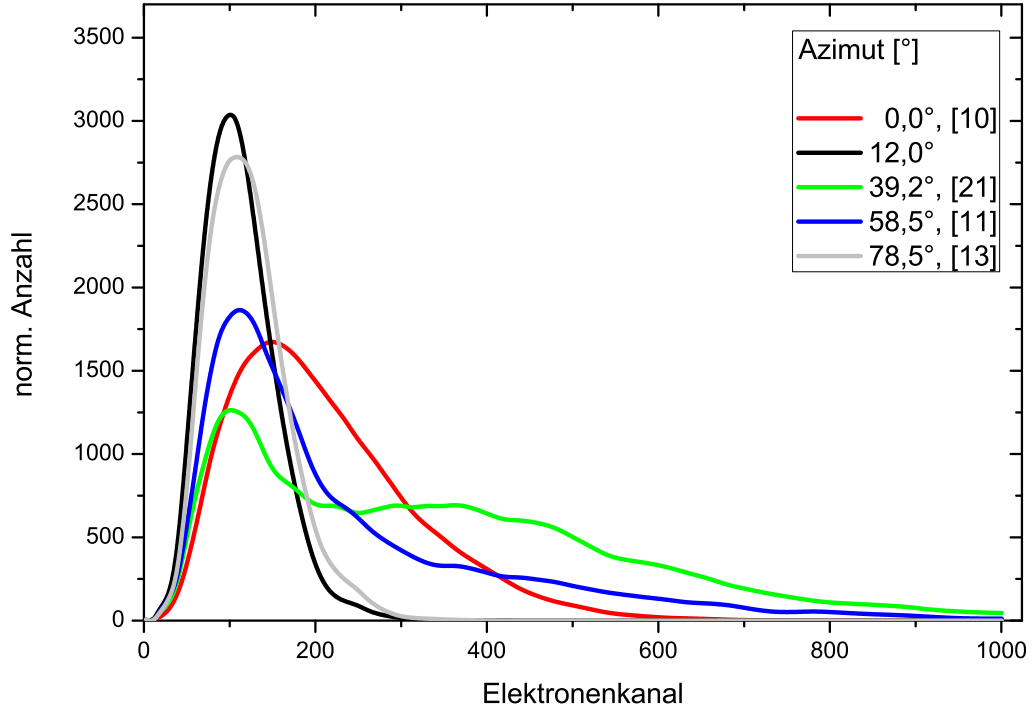


Abb. 4.12: simulierte Elektronenzahlspektren, 25 keV  $H^0$  an Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 1,5^\circ$  entlang verschiedener azimuthaler Richtungen

Die Ergebnisse der Simulation geben die gemessenen Elektronenzahlspektren gut wieder. Die Verschiebung des Maximums des Elektronenzahlspektrums für die entlang der [01]-Richtung gestreuten Projektilen zeigt sich auch im berechneten Elektronenzahlspektrum. Das Auftreten eines zweiten Maximums im Elektronenzahlspektrum für die entlang der [12]-Richtung gestreuten Projektilen ist auf eine Überschätzung der aus tieferen Lagen emittierten Elektronen zurückzuführen.

Kritisch zu den Berechnungen anzumerken bleibt jedoch, dass viele in die Rechnungen eingehende Parameter nur unzureichend bekannt sind. An erster Stelle ist das Wechselwirkungspotential zu nennen. Im Fall der Streuung von  $H^0$  an Mo(112) wird ein nach O'Connor und Biersack korrigiertes Moliere-Potential benutzt [75, 78]. Vergleiche der Simulationsergebnisse mit experimentellen Daten haben ergeben, dass diese Potentiale für die Streuung

an sauberen Metallen geringen Fehler liefern. Für die Streuung an Oxiden oder anderen Mischkristallen sind diese Potentiale aber vermutlich nicht ausreichend.

Eine weitere Unsicherheit ist die angenommene Elektronendichte und ihre Lokalisierung an den Atomrümpfen mit einer exponentiellen Abhängigkeit der Elektronendichte vom Abstand zum Atomkern und eine konstante Elektronendichte zwischen den Atomen. Auch die mittlere freie Weglänge der Elektronen im Kristall und somit die Wahrscheinlichkeit dafür, dass ein Elektron den Kristall verlassen kann, konnte nur grob aus anderen Experimenten abgeschätzt werden. Für die Abbremsung der Projektile innerhalb des Festkörpers wurde als einfaches Modell die Stokes'sche Reibung angenommen und der nukleare Energieverlust durch Energieübertragung auf das Atomgitter vernachlässigt [5, 12, 33, 84].

### 4.2.1 Strukturuntersuchungen an p(1x2)O/Mo(112) mittels Ionenstrahltriangulation

Als Anwendung der im vorigen Abschnitt vorgestellten Methode sollen nun zwei Beispiele vorgestellt werden, in denen eine Überstruktur auf Mo(112) mittels der Ionenstrahltriangulation bestimmt werden konnte. In Abb. 4.13 ist für die Streuung von 25 keV  $H^0$  an p(1x2)O/Mo(112) unter  $\phi_{in} = 0,9^\circ$  eine gemessene Ionenstrahltriangulationskurve dargestellt (schwarze Kurve). Erkennbar ist die Asymmetrie des [01]-Peaks wie für die Streuung an Mo(112) (vgl. Abb. 4.8). Daraus kann gefolgert werden, dass die Projektile nicht nur an Atomen der Überstruktur gestreut werden, sondern auch in das Substrat eindringen. Insgesamt sind für die Streuung von 25 keV  $H^0$  an p(1x2)O/Mo(112) deutlichere Strukturen sichtbar als bei der Streuung am sauberen Mo(112).

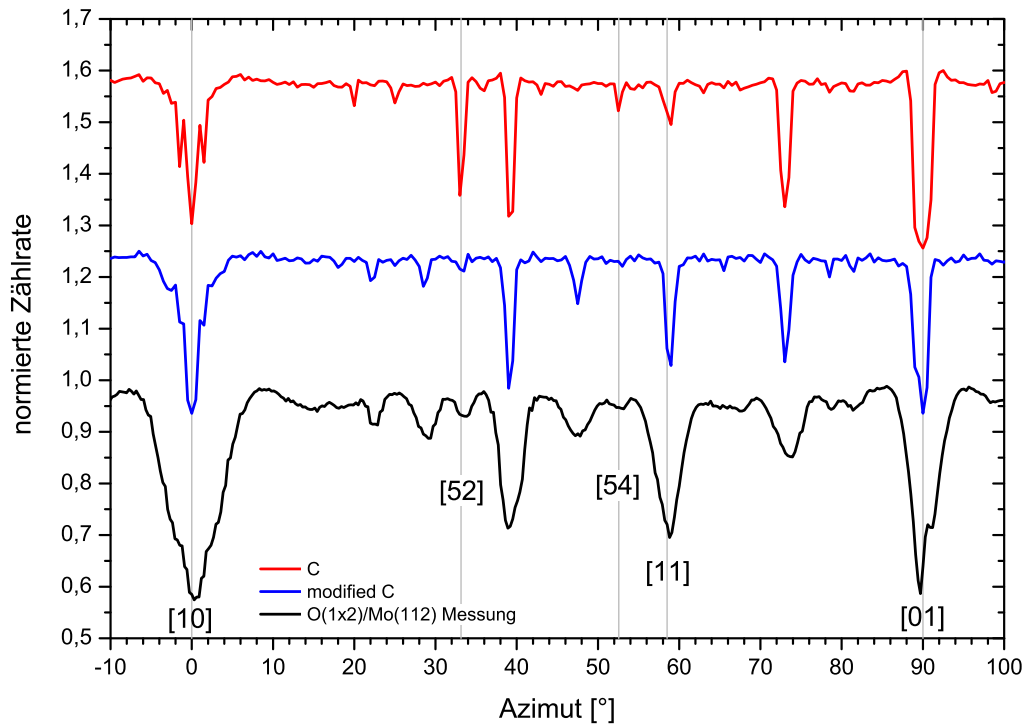


Abb. 4.13: Ionenstrahltriangulation für die Streuung von 25keV  $H^0$  an p(1x2)O/Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 0,9^\circ$

Für p(1x2)O/Mo(112) existieren in der Literatur mehrere unterschiedliche Strukturvorschläge [96, 97, 112]. Der Strukturvorschlag C aus [112] von

Sierka et al. ist in Abb. 4.14 a) dargestellt: Jede zweite oberste zur  $[10]$ -Richtung parallele Atomreihe fehlt („missing row“) und die Sauerstoff-Atome liegen dreifach koordiniert in der obersten Atomlage. Auf der Grundlage dieses Vorschlags wurden Ionenstrahltriangulationskurven berechnet und mit mehreren verschiedenen Strukturvorschlägen (aus [96, 97, 112]) verglichen. In Abb. 4.13 ist in rot die für den Strukturvorschlag von Sierka et al. errechnete Ionenstrahltriangulationskurve dargestellt. Es zeigen sich fast alle Minima für die richtigen azimuthalen Richtungen, also in Kanälen, die auch experimentell ermittelt wurden. Nicht passende Positionen für die berechneten Peaks ergeben sich lediglich für  $\theta=20^\circ$  und für  $\theta=25^\circ$ . Große Abweichungen sind aber in der Rangfolge der Peaks sichtbar, besonders deutlich wird das für den  $[11]$ -und den  $[52]$ -Kanal. Während der  $[11]$ -Kanal für die Ionenstrahltriangulationskurve auf Grundlage des Strukturvorschlags von Sierka et al. zu wenig ausgeprägt ist, ist der Peak des  $[52]$ -Kanals deutlich sichtbar.

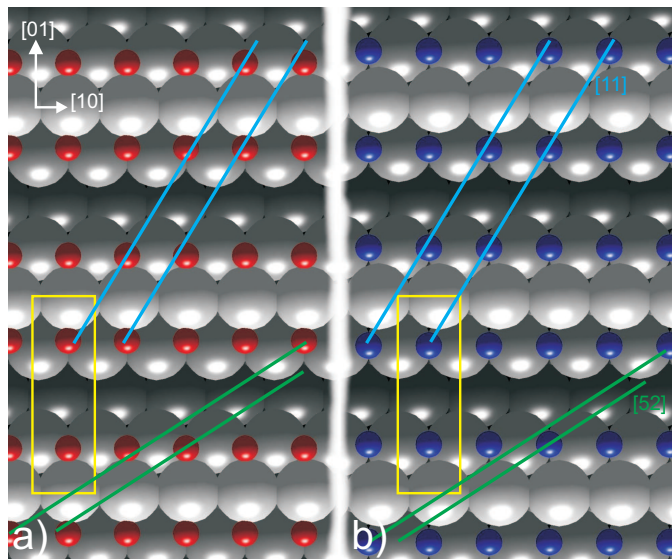


Abb. 4.14: Strukturmodell für  $p(1 \times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$ , links: „C“ aus [112] von Sierka et al., rechts: modifiziertes Modell C

Aufgrund von geometrischen Überlegungen wurde der Strukturvorschlag dahingehen angepasst, dass der  $[52]$ -Kanal geschlossen wird (modifiziertes Modell C). Das Ergebnis ist in Abb. 4.14 b) dargestellt. Wie in Abb. 4.15 dargestellt, wurden die Sauerstoff-Atome um  $0,36 \text{ \AA}$  von den jeweiligen Molybdän-Atomen in  $[10]$ -Richtung und um  $0,25 \text{ \AA}$  in  $[01]$ -Richtung verschoben. Dadurch schließt sich der  $[52]$ -Kanal und der  $[11]$ -Kanal wird etwas breiter. Im Modell von Sierka et al. sind die Mo-Atome in der obersten Lage um  $1/6$  der

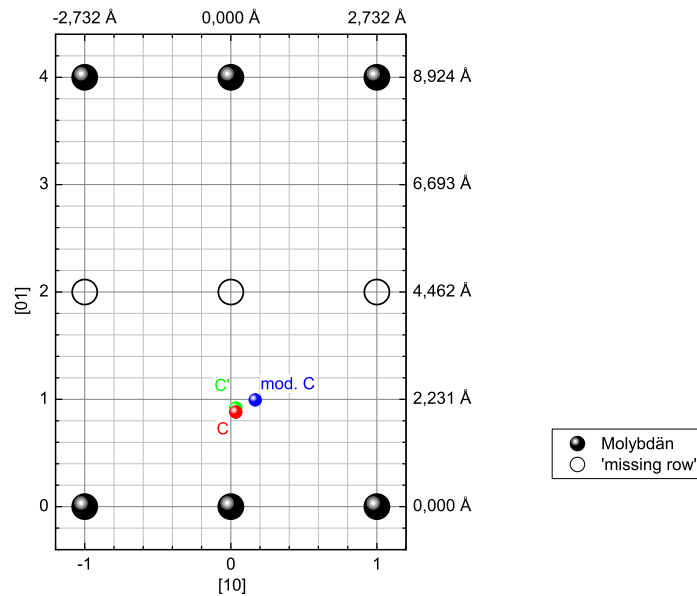


Abb. 4.15: Position der Sauerstoffatome in der  $p(1 \times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Struktur, rot: „C“ aus [112] von Sierka et al. , blau: modifiziertes Modell C, grün: Modell C mit minimaler Verschiebung der Sauerstoffatome

Einheitszelle verschoben, sie befinden sich deshalb in den Senken der zweiten Atomlage. Für das modifizierte Modell C wurden die Positionen der obersten Molybdän-Atome so geändert, dass sich die Struktur des  $\text{Mo}(112)$  fortsetzt.

Im Strukturvorschlag von Sierka et al. sind diese Mo-Atomketten um ein Zwölftel der Einheitszelle verschoben. Die Molybdän-Atome befinden sich dort im Zentrum der vier Atome der zweiten Lage. Die mittels dieses Strukturvorschlags simulierte Ionenstrahltriangulationskurve ist ebenfalls in Abb. 4.13 dargestellt (blaue Kurve). Es zeigt sich eine gute Übereinstimmung mit der experimentell ermittelten Ionenstrahltriangulationskurve. Die Größenverhältnisse der Peaks für den [11]- und den [52]- Kanal stimmen jetzt mit denen der experimentellen Kurve überein. Auch die viel kleineren Kanäle [41] (bei  $\theta=22^\circ$ ) und [31] (bei  $\theta=28^\circ$ ) werden korrekt durch die simulierte Kurve wiedergegeben. Lediglich die Breite der Kanäle wird in den Simulationen nicht zutreffend ermittelt.

Herr J. Seifert konnte eine zweite  $p(1 \times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$  -Struktur präparieren [107]. Dafür wurde der  $\text{Mo}(112)$  -Kristall bei  $600^\circ\text{C}$  und dem Kammerdruck  $p_K = 1,5 \cdot 10^{-8}$  ( $\text{O}_2$ ) für 80 s oxidiert (vgl.  $p(1 \times 2)$  II in der Übersicht in Abschnitt 4.1.2). Eine an dieser  $p(1 \times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Struktur gemessene



Ionenstrahltriangulationskurve ist in Abb. 4.16 dargestellt. Der Vergleich in Abb. 4.16 mit einer für den Strukturvorschlag C aus [112] berechneten Ionenstrahltriangulationskurve zeigt eine gute Übereinstimmung. Deutlich abweichend sind lediglich die Maxima zu beiden Seiten des [10]-Kanals. Diese Minima werden durch Fokussierungen der Projektile durch die zweite Atomlage verursacht. Sie werden in der Simulation nicht wiedergegeben. Die Sauerstoffatome des Strukturvorschlags C wurden minimal in Richtung der „missing row“ verschoben (C', grün in Abb. 4.15). Diese Verschiebung um 0,15 Å führte zu einer Verbesserung des Größenverhältnisses des [52] und des [21] - Peaks zueinander. Weil sich die Ionenstrahltriangulationskurven im übrigen sehr ähnlich sind wurde auf eine Darstellung der der Ionenstrahltriangulationskurve für das Strukturmodell C aus [112] an dieser Stelle verzichtet.

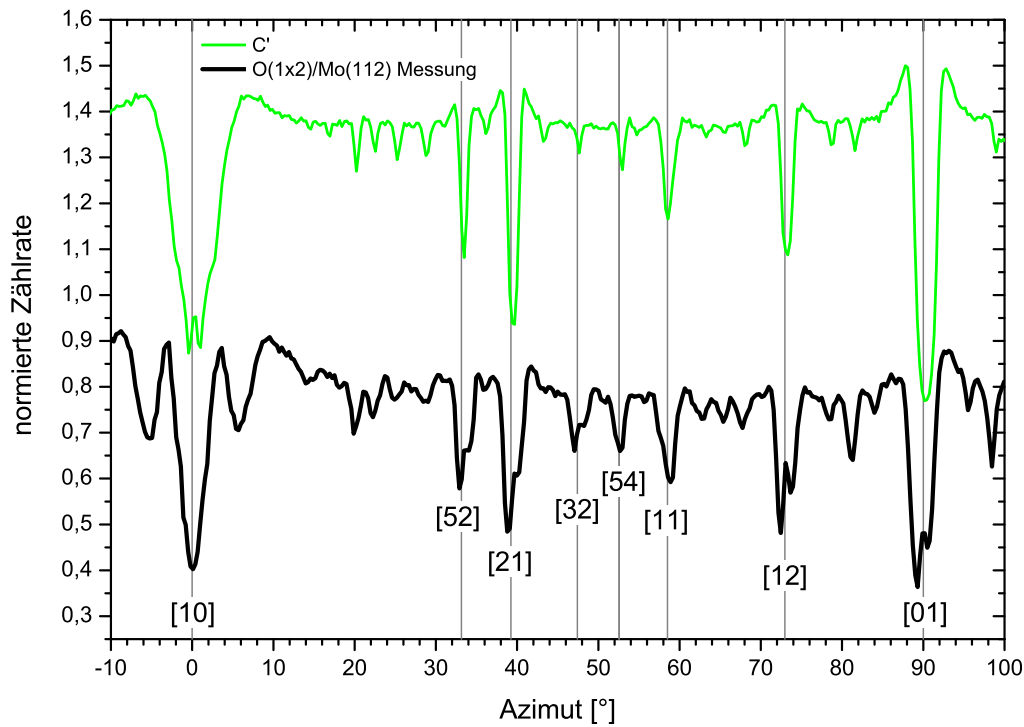


Abb. 4.16: Ionenstrahltriangulation für die Streuung von 25keV  $H^0$  an  $p(1 \times 2)O/Mo(112)$  unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 1,1^\circ$ , schwarze Kurve - experimentelle Daten, grüne Kurve - Simulation unter Verwendung von Strukturmodell C aus [112]

### 4.2.2 Strukturuntersuchungen an p(2x3)O/Mo(112) mittels Ionenstrahltriangulation

Als weiteres Beispiel soll p(2x3)O/Mo(112) betrachtet werden. In Abb. 4.17 sind Ionenstrahltriangulationskurven für die Streuung von  $H^0$  an p(1x2)O/Mo(112) und an p(2x3)O/Mo(112) dargestellt. Nur in wenigen azimuthalen Richtungen unterscheiden sich die Ionenstrahltriangulationskurven voneinander. Die Symmetrie insgesamt und die Rangfolge der Hauptrichtungen sind gleich. Unterschiede gibt es z.B. in der [32]-Richtung (grün markiert). Statt eines breiten Kanals für die p(1x2)O/Mo(112) -Struktur sind zwei kleinere Peaks für die p(2x3)O/Mo(112) -Struktur sichtbar.

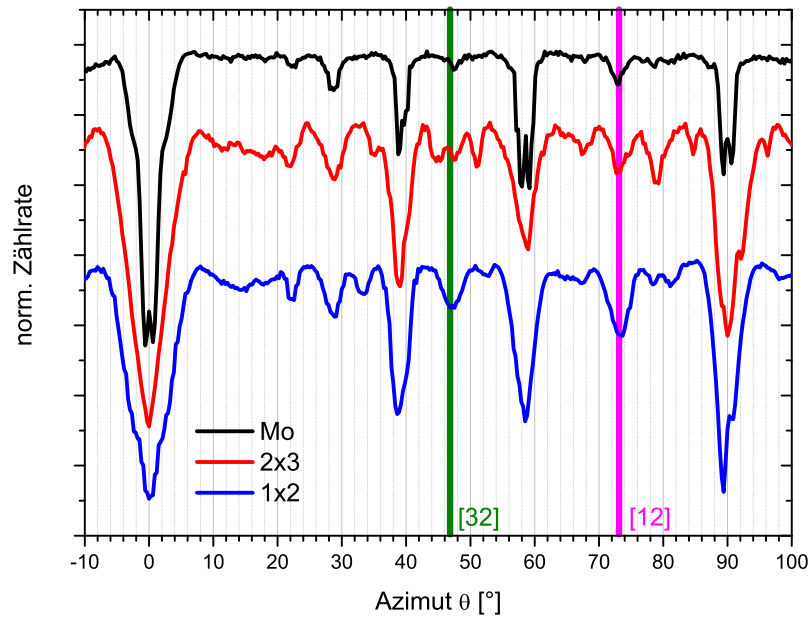


Abb. 4.17: Vergleich der Ionenstrahltriangulationskurven für die Streuung von 25keV  $H^0$  an Mo(112) (schwarze Kurve), p(2x3)O/Mo(112) (rote Kurve) und p(1x2)O/Mo(112) (blaue Kurve) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 0,9^\circ$

Für diese Struktur existieren in der Literatur keine zu den experimentellen Ionenstrahltriangulationskurven passenden Strukturvorschläge. So wird z.B. in den Strukturvorschlägen von Schröder et al. [100] und Kaya et al. [57]

der [01]-Kanal ( $\theta=90^\circ$  in Abb. 4.17) zu stark geschlossen. Die Simulationsergebnisse zu den Strukturvorschlägen von Todorova und Sierka [115] passen überhaupt nicht zu den experimentellen Daten.

Ausgehend von dem im letzten Abschnitt diskutierten Modell für die  $p(1 \times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Struktur wurden verschiedene Modelle für die  $p(2 \times 3)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Struktur aufgestellt und die simulierten Ionenstrahltriangulationskurven mit den experimentellen Daten verglichen. Die  $p(1 \times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Struktur hat eine „missing row“ entlang der [10]-Richtung. Bei Erweiterung der Einheitszelle von  $(1 \times 2)$  auf  $(2 \times 3)$  können statt dieser auch zwei Molybdän-Atomketten in der obersten Atomlage unbesetzt bleiben. Oder es existiert nur eine „missing row“ und dafür zwei geschlossene Ketten pro Einheitszelle. Die Simulationen ergeben, dass dies nicht der Fall ist, pro Einheitszelle ist nur eine [10]-Kette in der obersten Lage mit Molybdänatomen besetzt und zwei [10]-Ketten bleiben frei (Abb. 4.18). Diese zusätzlich fehlende Reihe würde zu einer starken Verbreiterung der niedrig indizierten Richtungen führen, wenn nicht die Sauerstoff-Atome die Kanäle teilweise wieder schließen würden. Die Sauerstoff-Atome wurden im Modell an exakt die Orte des  $p(1 \times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Modells positioniert. Der [32]-Kanal wird etwas geschlossen, dafür werden jeweils um eine Einheitszelle verschoben zwei Kanäle ([53] und [43]) geöffnet. Auch der [12]-Kanal wird geschlossen und die Richtungen [23] ( $67,8^\circ$ ) und [13] ( $78,5^\circ$ ) werden geöffnet.

In Abb. 4.19 ist das Ergebnis der Simulation der Elektronenemission auf Grundlage dieses Strukturvorschlags für  $p(2 \times 3)\text{O}/\text{Mo}(112)$  dargestellt. Die Ionenstrahltriangulationskurve stimmt gut mit der experimentell ermittelten Kurve überein. Dieser Strukturvorschlag gibt trotzdem nur einen Anhaltspunkt dafür, welche Eigenschaften die 'echte'  $p(2 \times 3)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Struktur haben muss. Obige Atompositionen entsprechen einer  $(1 \times 3)$  und keiner  $(2 \times 3)$ -Symmetrie. Die  $(2 \times 3)$ -Symmetrie kann auf der Grundlage des Vorschlags aber relativ einfach durch hinzufügen von Sauerstoff-Atomen in geeignete Positionen in den missing-row-Ketten erzeugt werden. Diese Positionen sind mit der hier vorgestellten Methode nicht auflösbar, d.h. Simulationen mit und ohne solche zusätzlichen, zur  $(2 \times 3)$ -Symmetrie führenden Sauerstoff-Atome ergeben gleiche theoretischen Ionenstrahltriangulationskurven. Aus AES-Untersuchungen an den verschiedenen Oxiden konnte für die  $p(2 \times 3)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Struktur ein Anzahlverhältnis der Molybdän-Atome zu den Sauerstoff-Atomen von 1,7 an der Oberfläche gefunden werden. Das bedeutet es müssten 10 Sauerstoff-Atome auf die  $(2 \times 3)$ -Einheitszelle (6 Molybdän-Atome) verteilt werden. Der hier präsentierte Strukturvorschlag enthält 6 Sauerstoff-Atome, es müssten 4 zusätzliche Sauerstoff-Atome in den Strukturvorschlag integriert werden.

Dass die Sauerstoff-Atome auf Positionen in den missing-row-Ketten, also

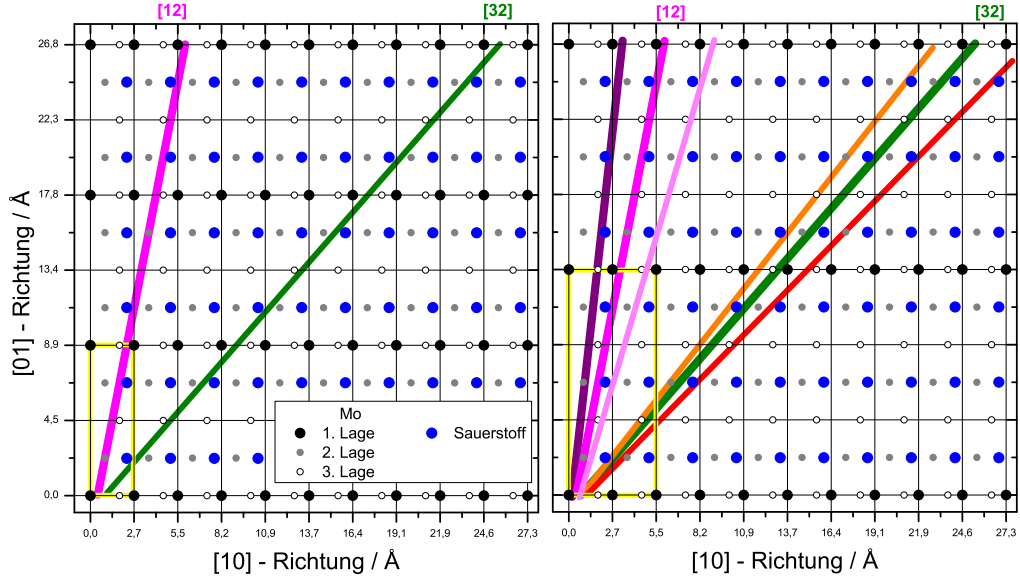


Abb. 4.18: Strukturmodell für die  $p(2 \times 3)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Struktur (rechts) und für die  $p(1 \times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Struktur (links), magenta [12]-Kanal, grün [32]-Kanal

in der zweiten Lage, nicht mittels der Ionenstrahltriangulation verifizierbar sind, ist ein Defizit dieser Methode. Die streifende Streuung von Atomen an einer Oberfläche führt zu einer hohen Sensitivität der Messergebnisse auf Positionen der Gitteratome in der ersten Atomlage der Oberfläche. Die Ionenstrahltriangulation ist auf Atompositionen in der zweiten Atomlage nur dann sensitiv, wenn die Projektile bis zur zweiten Lage durchdringen. Dies ist ausschließlich bei der Streuung der Projektile entlang sehr hoch indizierter Richtungen der Fall. In fast allen Fällen ist die zweite Lage dann jedoch bezüglich der ersten Lage symmetrisch. Effekte in den Messergebnissen, die auf die Streuung an der zweiten Lage zurückzuführen sind, sind nur schwer zu finden. Als Beispiel dafür, dass Projektile durch eine komplette erste Atomlage hindurch an einer zweiten Atomlage gestreut wurden und dort Elektronen ausgelöst haben kann die Streuung am sauberen  $\text{Mo}(112)$  angeführt werden. Die Asymmetrie des Maximums für den [01]-Kanal in den Ionenstrahltriangulationskurve kann nur auf die Streuung der Projektile an Atomen der zweiten Lage zurückgeführt werden.

Für die Streuung an den Oxid-Überstrukturen bedeuten diese kleinen Effekte in den Ionenstrahltriangulationskurven durch die Streuung an der zweiten Lage, dass es nicht möglich sein wird, die Existenz der Sauerstoff-

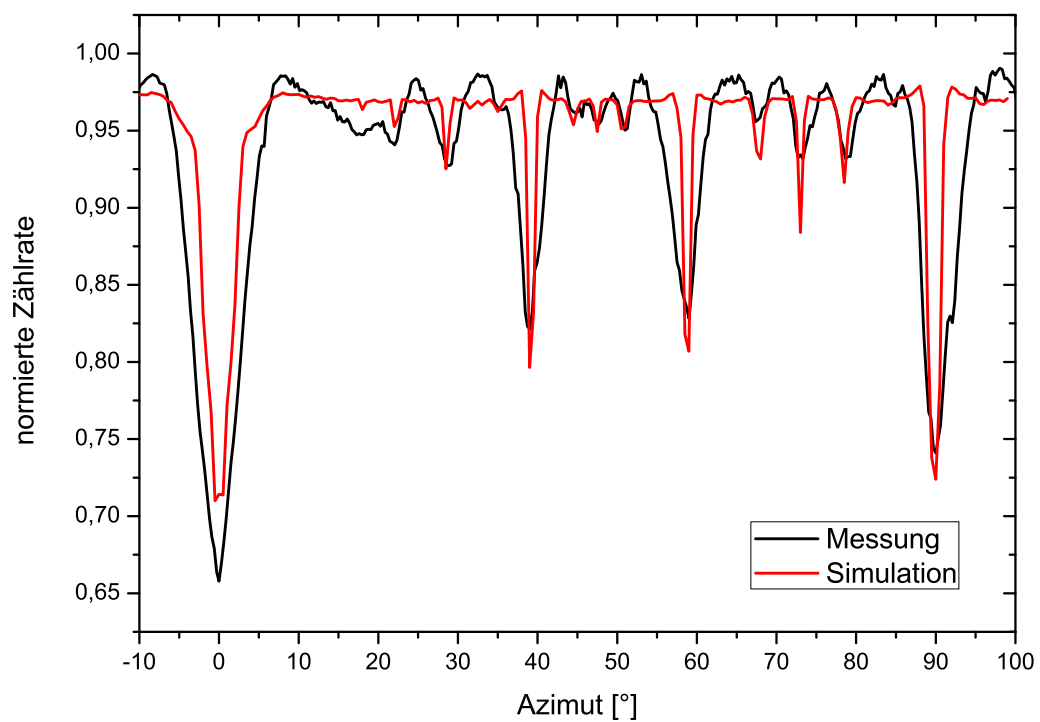


Abb. 4.19: Ionenstrahltriangulation für die Streuung von 25keV  $H^0$  an  $p(2 \times 3)O/Mo(112)$  unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 0,9^\circ$

Atome auf Positionen in den missing-row-Ketten aufzuklären.

### 4.3 Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission

Im folgenden Abschnitt werden Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission am reinen Mo(112)-Kristall und an der mit Sauerstoff und Siliziumoxid bedeckten Mo(112)-Oberfläche vorgestellt. Dabei werden insbesondere die Auswirkungen der sehr dünnen Sauerstoff-Adsorbate bzw. der zweilagigen SiO<sub>2</sub>-Schicht auf die Elektronenemission studiert.

#### 4.3.1 Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission am sauberen Mo(112)

Um die Ergebnisse der Experimente an den Sauerstoff und Siliziumoxid bedeckten Mo(112)-Oberflächen besser einordnen zu können, werden in diesem Abschnitt zunächst Ergebnisse der Studien zum Energieverlust der Projektile und zur Elektronenemission am reinen Mo(112)-Kristall präsentiert. Dafür wurden verschiedene Projektile ( $H^0$ ,  $He^0$ ,  $Ne^0$ ,  $Ar^0$ ) mit Energien von 0,5 keV bis 30 keV unter Einfallswinkeln von  $\phi_{in} = 0,5^\circ$  bis  $5,0^\circ$  am Mo(112)-Kristall gestreut und die dabei auftretenden Energieverluste der jeweiligen Projektile gemessen. Gleichzeitig wurden die dabei emittierten Elektronen detektiert. Dargestellt werden dann Energieverlustspektren von Streueignissen, bei denen kein, ein, zwei oder mehrere Elektronen emittiert wurden. Beispielhaft sind in Abb. 4.20 und Abb. 4.21 Energieverlustspektren für die Streuung von 1 keV  $He^0$  unter dem Einfallswinkel  $\phi_{in} = 1,35^\circ$  und  $\phi_{in} = 2,45^\circ$  dargestellt.

Die unter dem flacheren Einfallswinkel gestreuten Projektile (Abb. 4.20) zeigen, wenn bei dem Streuprozess kein Elektron emittiert wurde (blaue Kurve) nahezu keinen Energieverlust. Das Spektrum deckt sich fast mit dem des direkten Strahls. Dies sind Ereignisse, für deren Messung der ungestreute (sog. direkte) Strahl mit dem Channelplate detektiert wird. Die Projektile, die am Target gestreut wurden, aber zu keiner Elektronenemission geführt haben, verlieren also durch sonstige Prozesse nur wenig Energie. Bei der Streuung etwa jedes 150.ten Projektils wird ein Elektron von der Molybdän-Oberfläche emittiert. Dabei wird durch die Projektile durchschnittlich 12 eV ihrer Energie abgegeben.

Gänzlich verschieden ist die Situation bei der Streuung unter dem steileren Einfallswinkel. Die Projektile verlieren, auch wenn kein Elektron emittiert

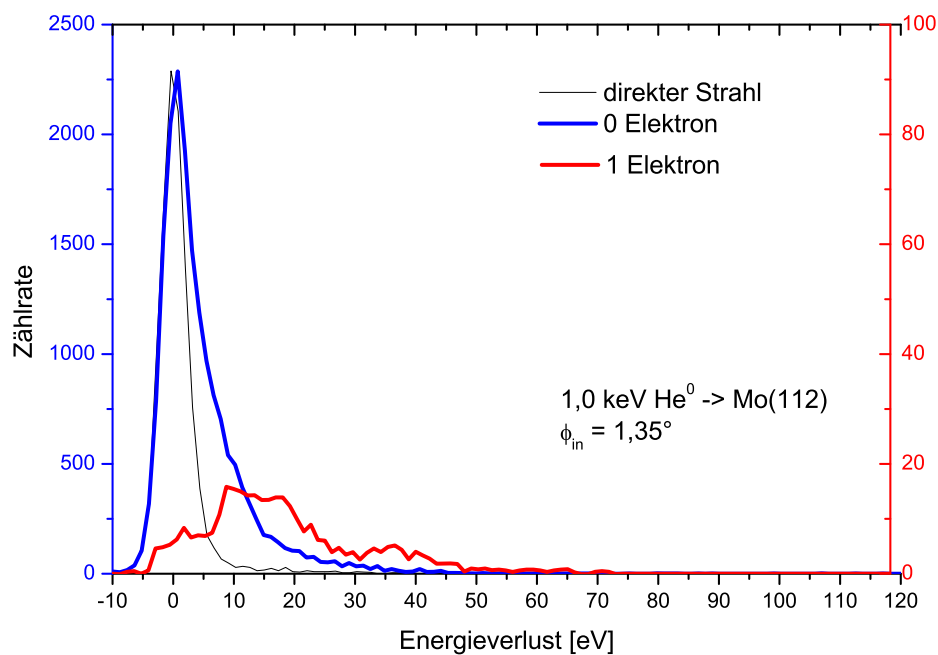


Abb. 4.20: Energieverlustspektren für die Streuung von 1 keV  $\text{He}^0$  an Mo(112) unter einem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 1,35^\circ$

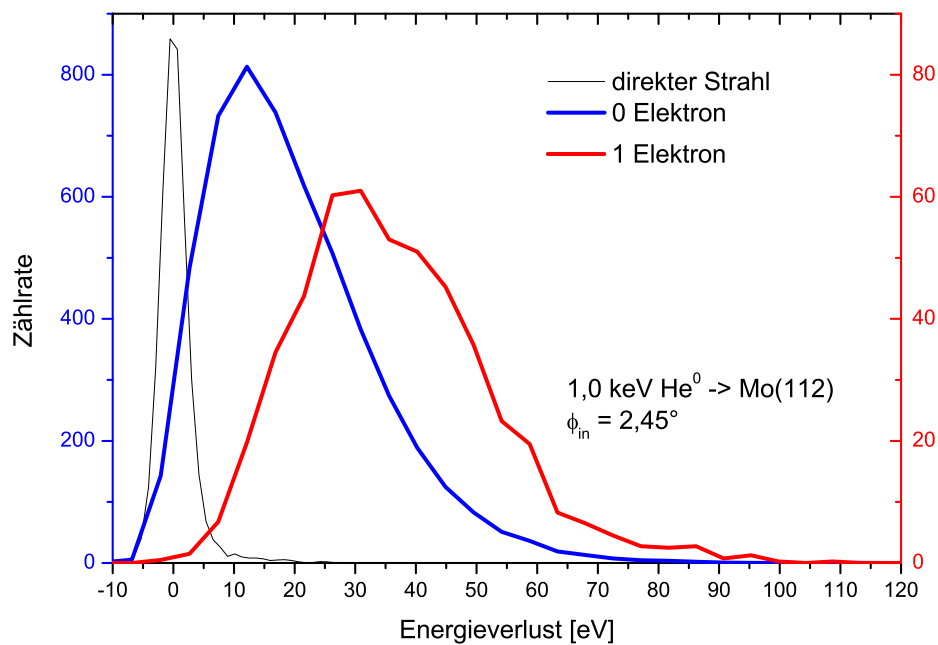


Abb. 4.21: Energieverlustspektren für die Streuung von 1 keV  $\text{He}^0$  an Mo(112) unter einem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 2,45^\circ$

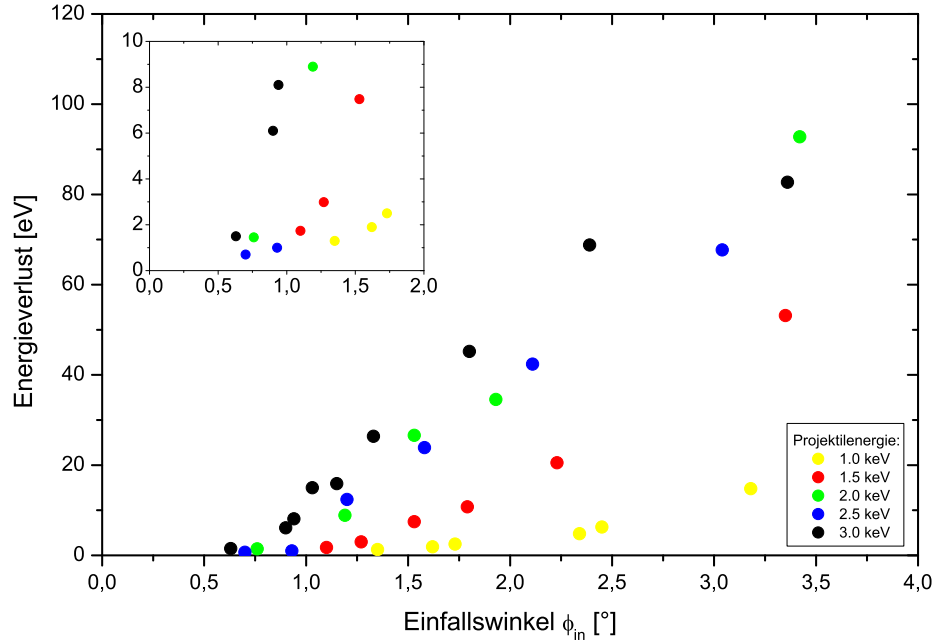


Abb. 4.22: Energieverlust der Projektile, die kein Elektron ausgelöst haben, für die Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{Mo}(112)$ , Projektilenergie 1,0 bis 3,0 keV, innere Grafik: Vergrößerung für Einfallswinkel bis  $2,0^\circ$  und Energieverluste bis 10 eV

wird, etwa Energie von 12 eV. Außerdem ist die Energieverteilung viel breiter und gibt nicht mehr die Energieverteilung des direkten Strahls wieder. Etwa 13% der Streuereignisse führen zur Emission eines Elektrons. Dabei verlieren die Projektile ca. 32 eV an kinetischer Energie. Für die Emission des Elektrons wurden also bei der Streuung unter dem steileren Einfallswinkel 20 eV aufgebracht, bei der Streuung unter dem flacheren Einfallswinkel waren es 12 eV.

Diese Energieverluste erscheinen im Vergleich zu z.B. an  $\text{Al}(111)$  gemessenen Energieverlusten zu groß [10]. An  $\text{Al}(111)$  wurden unter vergleichbaren Bedingungen  $\approx 7$  eV Energieverlust für die Emission eines Elektrons gemessen. Die 12 eV Energieverlust der Projektile, die kein Elektron ausgelöst haben, wurden hingegen auch für die Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{Al}(111)$  gemessen.

In Abb. 4.22 sind die Energieverluste für  $\text{He}^0$ -Projektile, die kein Elektron ausgelöst haben, als Funktion des Einfallswinkels für Primärenergien von 1,0 keV bis 3,0 keV dargestellt. Dabei ist der Trend zu erkennen, dass gestreute Atome mit größeren Parallelenergien bei der Streuung auch mehr Energie verlieren. Außerdem führen steilere Einfallswinkel zu größeren Energieverlust-



ten. Die Projektile kommen in beiden Fällen näher an die Targetoberfläche heran oder dringen sogar etwas ein. In diesem Bereich ist auch die Elektrodendichte höher als in weiterem Abstand zur Oberfläche und die Projektile verlieren durch Reibung im „Elektronensee“ Energie. Dies tun sie umso mehr, desto tiefer sie in den Bereich eindringen, in dem die sich die Elektronen des metallischen Targets aufhalten.

In Abb. 4.23 sind die Differenzen des Energieverlusts der  $\text{He}^0$ -Projektile, die ein Elektron ausgelöst haben und der  $\text{He}^0$ -Projektile, die kein Elektron ausgelöst haben, als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{\text{in}}$  dargestellt. Daraus kann direkt die zur Emission eines Elektrons nötige Energie entnommen werden. Trotz der Streuung der Werte läßt sich als Trend ablesen, dass bei großen Senkrechtenergien etwa 15 eV zur Emission eines Elektrons benötigt werden. Für Projektile mit 1 keV und unter  $\phi_{\text{in}} = 1^\circ$  werden ca. 5 eV Energieverlust gemessen. Die Austrittsarbeit von Mo(112) beträgt 4,5 eV [68], mindestens diese Energie müssen die Projektile also abgegeben haben, wenn ein Elektron registriert wird.

Die Elektronenausbeute pro Streueignis ist in Abb. 4.24 in Abhängigkeit vom Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}}$  aufgetragen. Deutlich wird, dass für kleine Senkrechtenergien der  $\text{He}^0$ -Projektile, also kleine Parallelenergie und flacher Einfallswinkel, nur wenige Elektronen pro Streuprozess nachgewiesen wurden. Für Projektile, die auf 1 keV beschleunigt wurden, und unter einem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} \approx 1,5^\circ$  am Mo(112)-Kristall streuen beträgt die Elektronenausbeute nur ca. 1%. 3 keV- $\text{He}^0$ -Projektile lösen bei gleichem Einfallswinkel mit 30% Wahrscheinlichkeit ein Elektron aus. Ein ähnliches Verhalten wurde an anderen metallischen Kristalloberflächen beobachtet [10, 64].

Weitere Studien zur Elektronenemission an Mo(112) wurden von Nestler im Rahmen seiner Diplomarbeit durchgeführt [76]. Es wurde zum einen die Schwelle der Elektronenemission für die Streuung von  $\text{He}^0$  an Mo(112) untersucht, außerdem wurden Ladungstransferprozesse an der Oberfläche energieaufgelöst untersucht.

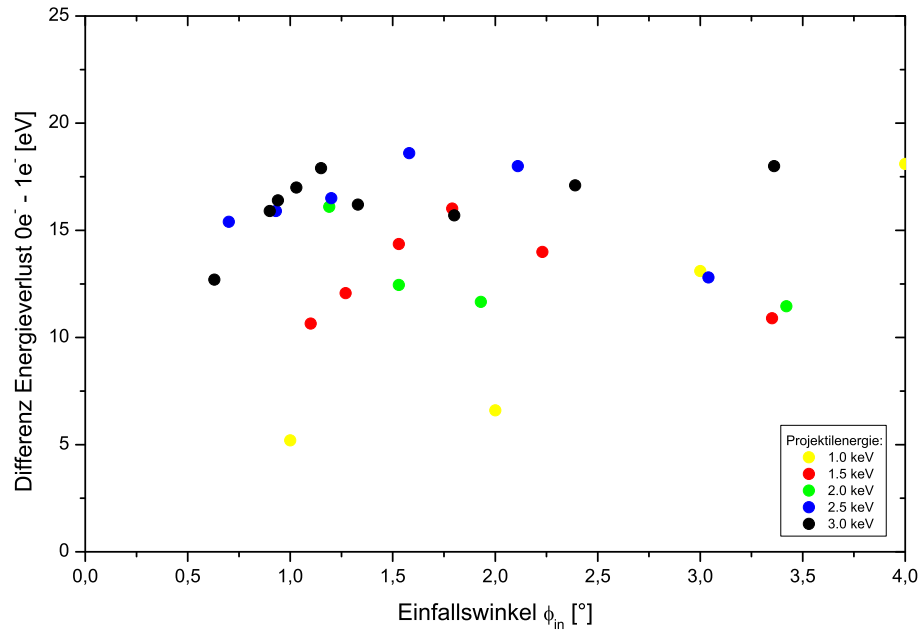


Abb. 4.23: Differenz des Energieverlusts der  $He^0$ -Projektile, die ein Elektron ausgelöst haben und der  $He^0$ -Projektile, die kein Elektron ausgelöst haben, für die Streuung von  $He^0$  an Mo(112)

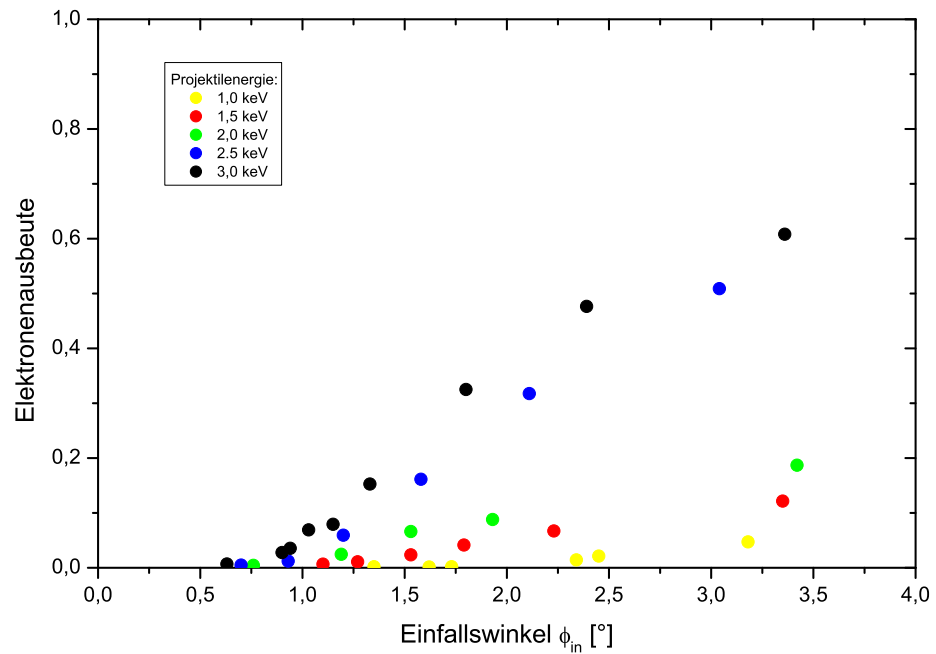


Abb. 4.24: Elektronenausbeute für die Streuung von  $He^0$  an Mo(112)

### 4.3.2 Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission am der mit Sauerstoff bedeckten Mo(112)-Oberfläche

In diesem Abschnitt werden Experimente zum Energieverlust der  $\text{He}^0$ -Projekte und zur Elektronenemission am mit verschiedenen Oxidfilmen bedeckten Mo(112) -Kristall vorgestellt. Dabei werden insbesondere Vergleiche mit den Ergebnissen zur Streuung an Mo(112) angestellt.

In den Abbildungen 4.25 und 4.26 sind Energieverlustspektren für die Streuung von 1 keV  $\text{He}^0$  an p(1x2)O/Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 0,58^\circ$  bzw.  $\phi_{\text{in}} = 2,59^\circ$  dargestellt. Dabei repräsentiert jeweils die blaue Kurve Ereignisse ohne die Emission eines Elektrons und die rote Kurve Ereignisse mit der Emission eines Elektrons pro gestreutem  $\text{He}^0$ -Projektil.

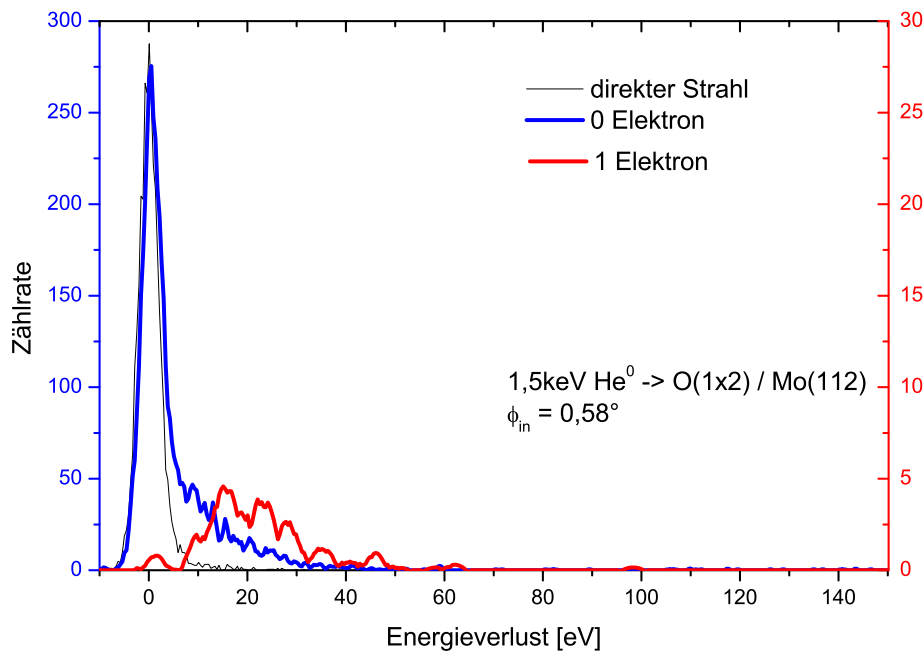


Abb. 4.25: Energieverlustspektren für die Streuung von 1 keV  $\text{He}^0$  an p(1x2)O/Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 0,58^\circ$

Sehr auffällig, besonders im Vergleich zu den Daten zur Streuung unter flachem Einfallswinkel an Mo(112), ist die wesentlich schmalere Kurvenform für die Energieverluste der Projektile, die kein Elektron ausgelöst haben in Abb. 4.25 (blaue Kurve). Der Vergleich des Energieverlustspektrums mit dem

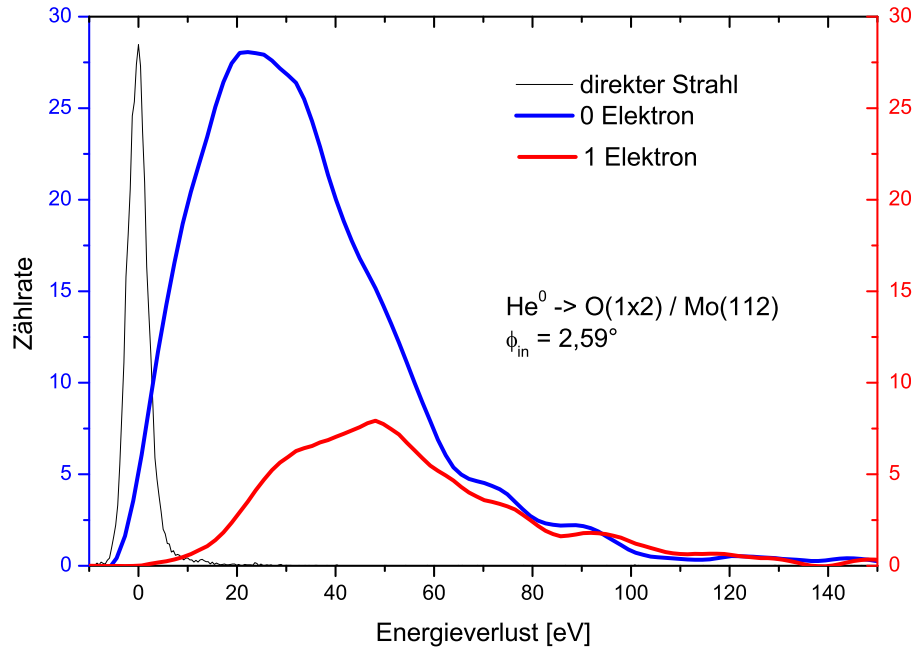


Abb. 4.26: Energieverlustspektren für die Streuung von 1 keV  $\text{He}^0$  an  $\text{p}(1\times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$  unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 2,59^\circ$

Spektrum für den direkten, also nicht am Target gestreuten Strahl (schwarze Kurve), zeigt, dass die Projektile in ihrer Mehrzahl nur minimal Energie während der Streuung abgegeben haben. Auch eine Verbreiterung des Energieverlustspektrums ist nicht erkennbar. Die Breite des Peaks im Energieverlustspektrum wird allein durch die Breite der Energieverteilung des direkten Strahls vorgegeben. Im Energieverlustspektrum der Projektile, die ein Elektron ausgelöst haben, ist der erste Peak bei ca. 16 eV zu erkennen. Weitere diskrete Linien sind für 23 eV und 29 eV Energieverlust sichtbar. Auch diese Strukturen sind ein Unterschied zu den Beobachtungen am sauberen  $\text{Mo}(112)$ -Target. Die in Abb. 4.26 dargestellten Energieverlustspektren für die Streuung von  $\text{He}^0$  unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 2,59^\circ$  gleichen im Gegensatz dazu jenen Spektren vom  $\text{Mo}(112)$ . Der mittlere Energieverlust beträgt ohne Emission eines Elektrons ca. 24 eV und mit der Emission eines Elektrons ca. 45 eV.

In Abb. 4.27 sind die mittleren Energieverluste für die Streuung am  $\text{Mo}(112)$  (geschlossene Kreise) und für die Streuung an der  $\text{p}(1\times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Überstruktur (offene Kreise) als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{\text{in}}$  und für verschiedene Projektilenergien dargestellt. Die Energieverluste für die Streuung an der  $\text{p}(1\times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$ -Überstruktur sind außer für die 3 keV-Projektile für alle Projektilenergien kleiner als bei der Streuung an  $\text{Mo}(112)$ . Die Projektile

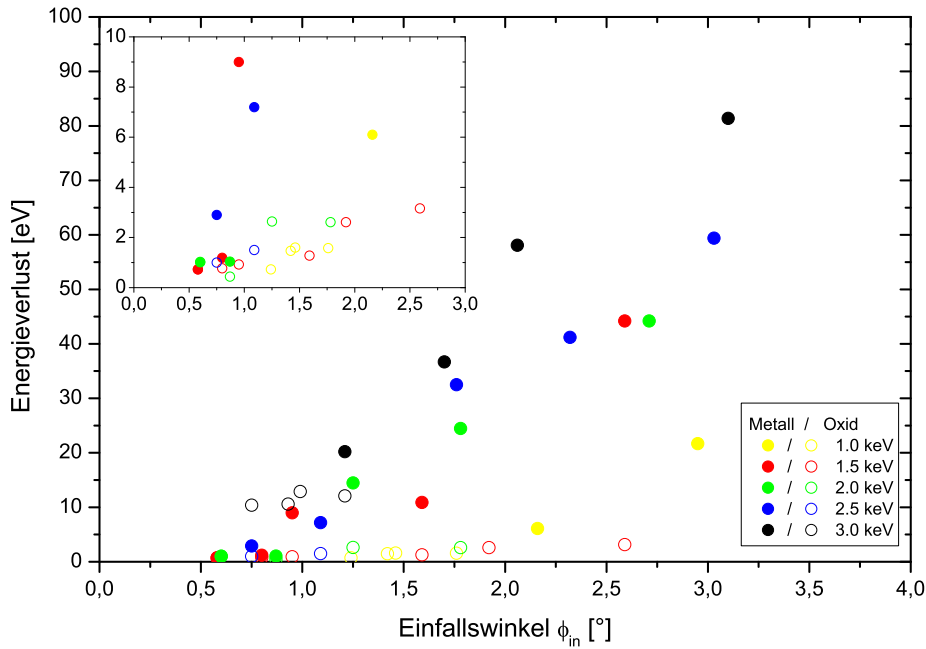


Abb. 4.27: Energieverlust der Projektile die kein Elektron ausgelöst haben, für die Streuung von  $\text{He}^0$  an p(1x2)O/Mo(112) (offene Kreise) und an Mo(112) (ausgefüllte Kreise)

mit 3 keV Projektilenergie zeigen mit der Streuung am Metall vergleichbare Energieverluste. Die Senkrechterenergie für diese Streuereignisse war so hoch, dass die Trajektorien der Projektile sehr dicht an die Targetoberfläche herankamen. Dort wurden die Projektile durch die höhere Elektronendichte wieder ähnlich wie am sauberen Mo(112)-Target gebremst.

Nur für sehr kleine Senkrechterenergien ( $E < 2,5$  keV und  $\phi_{in} < 1,0^\circ$ ) wurden am sauberen Mo(112)-Target ähnlich kleine Energieverluste gemessen wie am Oxid. Für steilere Einfallswinkel wächst der Energieverlust bei der Streuung am sauberen Mo(112)-Target viel stärker als bei der Streuung am Oxid. Bei der Streuung am oxidischen p(1x2)O/Mo(112) werden erst für sehr große Senkrechterenergien ähnlich große Energieverluste gemessen wie an metallischen Targets.

Die zur Emission eines Elektrons nötige Energie ist in Abb. 4.28 für die Streuung von  $\text{He}^0$  an p(1x2)O/Mo(112) (offene Kreise) und an Mo(112) (ausgefüllte Kreise) dargestellt. Diese Energie ergibt sich aus der Differenz der Energieverluste der  $\text{He}^0$ -Projektile, die ein Elektron ausgelöst haben und der  $\text{He}^0$ -Projektile, die kein Elektron ausgelöst haben. Der Darstellung kann man entnehmen, dass die Energie zur Emission eines Elektrons bei der Streuung am sauberen Mo(112)-Target ca. 20 eV beträgt und bei der Streuung an an

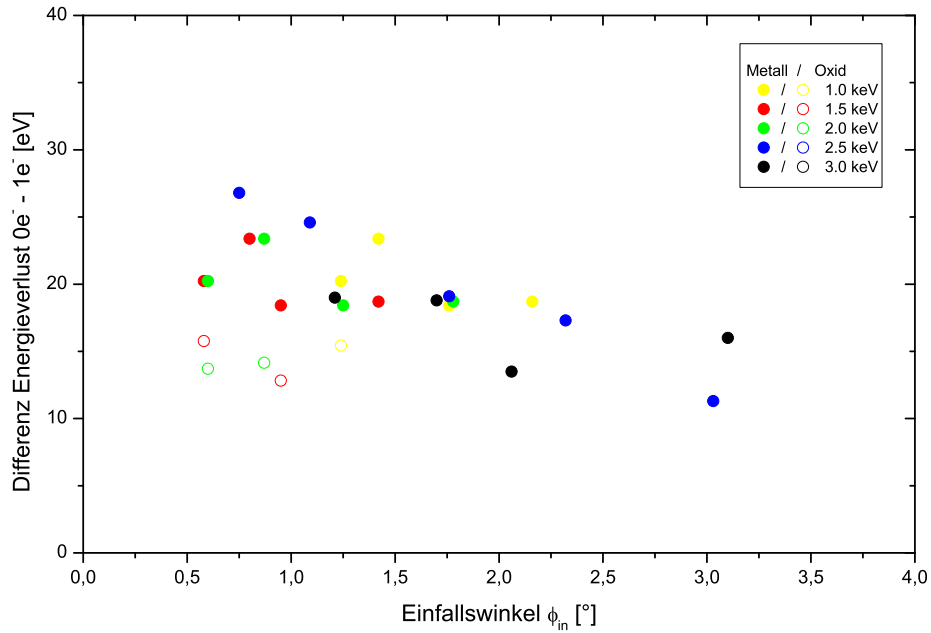


Abb. 4.28: Differenz des Energieverlusts der  $\text{He}^0$ -Projektile, die ein Elektron ausgelöst haben und der  $\text{He}^0$ -Projektile, die kein Elektron ausgelöst haben, für die Streuung von  $\text{He}^0$  an p(1x2)O/Mo(112) (offene Kreise) und an Mo(112) (ausgefüllte Kreise)

p(1x2)O/Mo(112) nur ca. 15 eV zur Emission eines Elektrons aufgewendet werden.

In Abb. 4.29 ist die Elektronenausbeute für die Streuung an p(1x2)O/Mo(112) und für die Streuung an Mo(112) als Funktion des Einfallswinkels dargestellt. Dabei ist zu erkennen, dass für jede der dargestellten Projektilenergien die Elektronenausbeute für die Streuung am Oxid höher ist als für die Streuung am metallischen Target. Nur für sehr kleine Projektilenergien sind geringe Elektronenausbeuten von unter fünf Elektronen pro 100 Streueignissen möglich. Für Projektilenergien größer als 2 keV werden schon für sehr kleine Einfallswinkel  $\phi_{in}$  Elektronenausbeuten gemessen.

Die Entwicklung des Energieverlustes und der Elektronenausbeute mit dem Einfallswinkel  $\phi_{in}$  sind für die Streuung am sauberen Mo(112)-Target und am oxidischen p(1x2)O/Mo(112) deutlich verschieden.

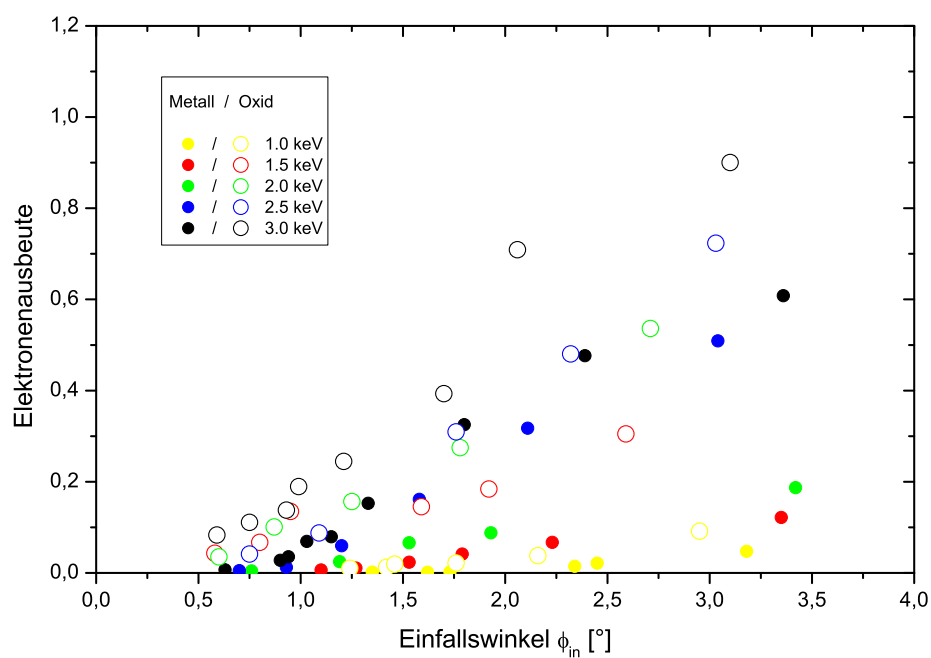


Abb. 4.29: Elektronenausbeute als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{in}$  für die Streuung von  $\text{He}^0$  an p(1x2)O/Mo(112) (offene Kreise) und an Mo(112) (ausgefüllte Kreise)

### 4.3.3 Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission am mit SiO bedeckten Mo(112)

In den Abb. 4.30 und 4.31 sind beispielhaft Energieverlustspektren für 1,5 keV  $\text{He}^0$ -Projekte, die unter  $\phi_{\text{in}} = 0,73^\circ$  und unter  $\phi_{\text{in}} = 2,93^\circ$  am mit SiO bedecktem Mo(112) gestreut wurden, gezeigt. Dabei wurden in blau (linke Ordinate) diejenigen Ereignisse dargestellt, bei denen kein Elektron ausgelöst wurde. In rot wurden Ereignisse mit der Emission eines Elektrons dargestellt (rechte Ordinate). Bei der Streuung unter dem flachen Einfallswinkel (Abb. 4.30) wird kein Energieverlust der Projekte gemessen. Die Breite des Energieverlustspektrums wird ausschließlich durch die Breite des direkten Strahls bestimmt. Dabei werden für diesen Einfallswinkel fast keine Streueignisse registriert, bei denen ein Elektron emittiert wurde.

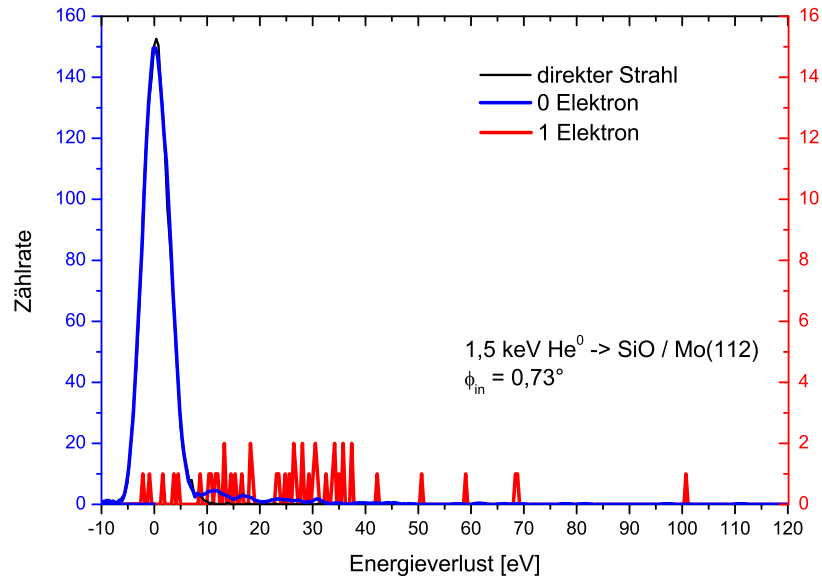


Abb. 4.30: Energieverlustspektren für die Streuung von 1,5 keV  $\text{He}^0$  an Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 0,73^\circ$

Völlig anders stellen sich die Energieverlustspektren der Projekte dar, die unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 2,93^\circ$  gestreut wurden (Abb. 4.31). Das Energieverlustspektrum der Projekte, die kein Elektron ausgelöst haben (blaue Kurve), weist zwei scharfe, voneinander getrennte Peaks auf. Dabei ist der Energieverlust für die Streueignisse des ersten Peaks etwa 0,4 eV. Die Projekte wurden also in etwa so, wie jene unter  $\phi_{\text{in}} = 0,73^\circ$  gestreut. Sie haben fast keine Energie beim Streuprozess verloren. Das Spektrum bildet



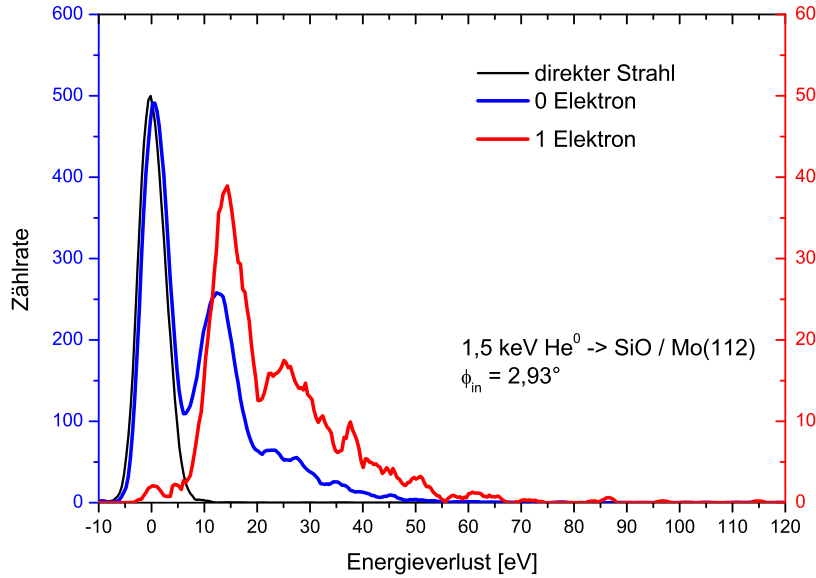


Abb. 4.31: Energieverlustspektren für die Streuung von 1,5 keV  $\text{He}^0$  an Mo(112) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 2,93^\circ$

somit wieder nahezu das Spektrum des direkten Strahls ab. Der zweite Peak repräsentiert Streueignisse, während derer die Projektile zusätzlich 11,5 eV verloren haben. Außerdem ist der Peak im Vergleich zum ersten Peak leicht verbreitert. Mit zusätzlichen 11,5 eV Energieverlust und einer weiteren Verbreiterung läßt sich ein dritter Peak finden, und somit das gesamte Spektrum gut wiedergeben. Diese Energieverluste können der Anregung von Exzitonen zugeschrieben werden. Roncin et al. führen in [94] für die Streuung von 600 eV Protonen an LiF(001) die diskreten Maxima in den Elektronenspektren auf die Anregung von Oberflächenexzitonen zurück. Roncin et al. beobachten die diskreten Maxima mit einem Abstand von 11,9 eV zueinander und beschreiben ein Exziton als eine lokale Anregung eines Fluorions im Gitter mit einer Anregungsenergie von ca. 1 eV unterhalb des Vakuumniveaus. Die Bandlücke im LiF beträgt vom Valenzband bis zum Vakuumniveau ca. 13 eV, folglich entspricht der experimentelle Energieverlust  $\Delta E = 11,9$  eV der Lücke vom Valenzband bis zum Oberflächenexziton.

Das als rote Kurve dargestellte Energieverlustspektrum der Projektile, bei deren Streuung ein Elektron ausgelöst wurde, zeigt eine ähnliche Struktur wie das oben beschriebene Energieverlustspektrum der Streueignisse ohne Elektronenemission. Das Energieverlustspektrum ist lediglich um den zur Emission eines Elektrons nötigen Energiebetrag von 13,8 eV verschoben. Der energetische Abstand des ersten und zweiten Peaks innerhalb dieses Spek-

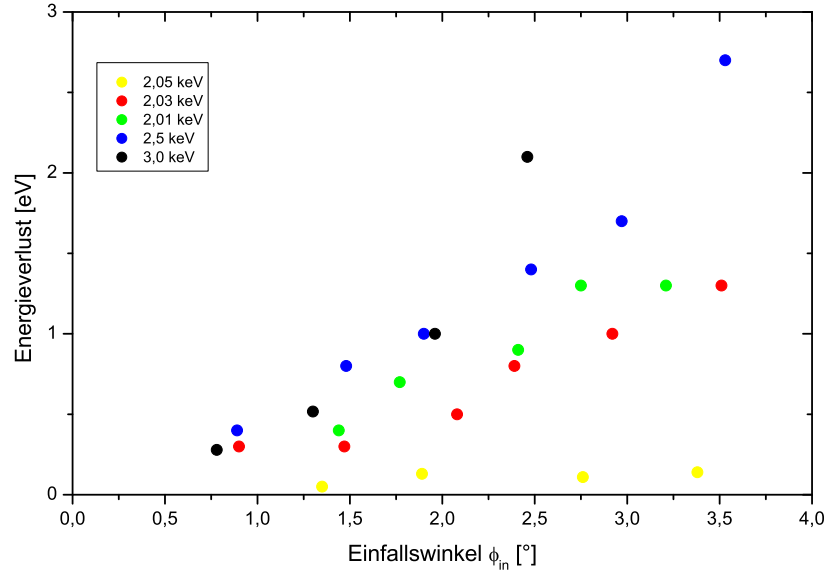


Abb. 4.32: Energieverlust (als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{in}$ ) der Projektile, die kein Elektron ausgelöst haben, für die Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{SiO}/\text{Mo}(112)$

trums beträgt, wie in dem Energieverlustspektrum für die Projektile, die kein Elektron ausgelöst haben,  $\Delta E = 11,9$  eV.

Die 13,8 eV Energieverlust für die Projektile, die ein Elektron ausgelöst haben, deuten auf eine Bandlücke an der Oberfläche in dieser Größe hin. In der Literatur sind jedoch kleinere Werte zu finden [39].

Die Energieverluste für die Projektile, die weder ein Elektron noch ein Exziton angeregt haben sind in Abb. 4.32 dargestellt. Der Energieverlust der Projektile entwickelt sich dabei von deutlich unter 1 eV für sehr kleine Projektilenergien bis etwa 2 eV für 3 keV Parallelenergie. Der Einfluss der Senkrechtenergie ist dabei nur sehr schwach. Ein Unterschied im Vergleich zur Streuung an den Oxiden ist neben der Schärfe des Peaks die Entwicklung des Energieverlustes der Projektile mit dem Einfallswinkel  $\phi_{in}$ . Bei der Streuung an  $\text{p}(1 \times 2)\text{O}/\text{Mo}(112)$  konnte beobachtet werden, dass die Projektile ab einer bestimmten Senkrechtenergie so tief in den Kristall eindringen, dass ein metallischer Energieverlust beobachtet wird. Für die Streuung am mit SiO bedeckten Molybdän wird ein solches Verhalten der Projektile nicht beobachtet. Die Projektile werden im gesamten untersuchten Senkrechtenergiebereich an der SiO - Schicht gestreut und durchdringen die SiO-Schicht nicht. Aus diesem Umstand läßt sich auf eine sehr defektfreie und vor allem komplett geschlossene SiO-Schicht schließen.

In den Abb. 4.33 und 4.34 sind die zur Emission von Elektronen bzw. zur Anregung von Exzitonen nötigen Energien als Funktion des Einfallswin-

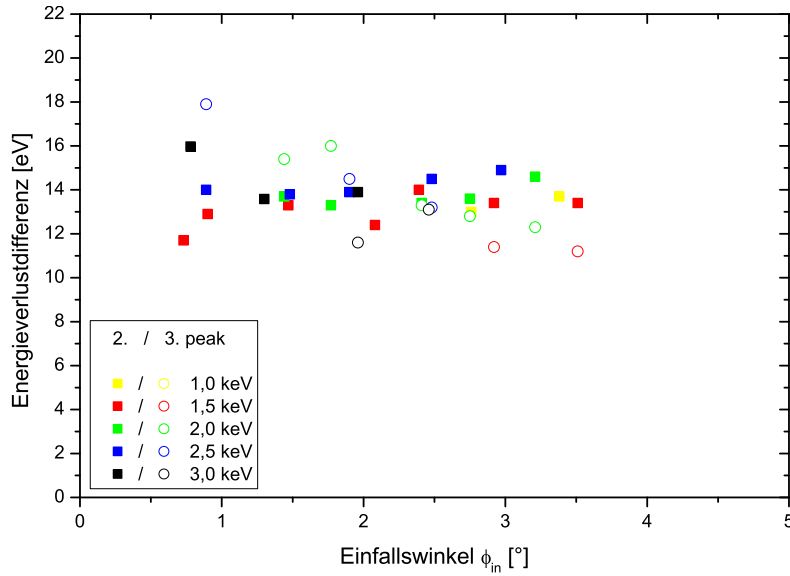


Abb. 4.33: Differenz der Energieverluste als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{in}$  für Emission eines Elektrons (Quadrate) und für Emission von zwei Elektronen (Kreise) für die Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{SiO}/\text{Mo}(112)$

kel  $\phi_{in}$  für verschiedene Projektilenergien aufgetragen. Dafür wurden, um die absoluten Energieverluste der durch die Peaks repräsentierten Ereignisse zu bestimmen, Gaußkurven an die Peaks in den Energieverlustspektren angepasst. Um eine klarere Aussage zu der für einen bestimmten Prozess nötigen Energie treffen zu können, wurden nur die für den entsprechenden Prozess zusätzlich nötige Energie aufgetragen.

Der Abb. 4.33 kann man entnehmen, dass für die Emission des ersten und des zweiten Elektrons etwa 14 eV aufgebracht werden müssen. Die Werte sind nur für sicher auswertbare Spektren dargestellt. Auf die Darstellung der Fehlerbalken wurde zugunsten der Übersichtlichkeit verzichtet. Die Messfehler werden mit  $\pm 1,5$  eV angegeben. Unter Berücksichtigung dieser Fehler läßt sich den Daten kein Trend bezüglich der Parallel- oder der Senkrechtenenergie entnehmen. Auch ein Unterschied im Energieverlust für die Emission des ersten und des zweiten Elektrons läßt sich nicht feststellen.

Die in Abb. 4.34 dargestellten Energiedifferenzen, die zur Anregung eines bzw. eines zweiten Exzitons nötig sind, zeigen unterschiedliche Anregungsenergien für das erste und das zweite Exziton. Für die Anregung des ersten Exzitons werden unabhängig vom Einfallswinkel und für alle Parallelenergien ca. 11,5 eV aufgewendet. Für die Anregung des zweiten Exzitons werden für kleine Senkrechtenenergien bis zu 18 eV und bei größeren Einfallswinkeln wiederum 11,5 eV vom Projektil abgegeben.

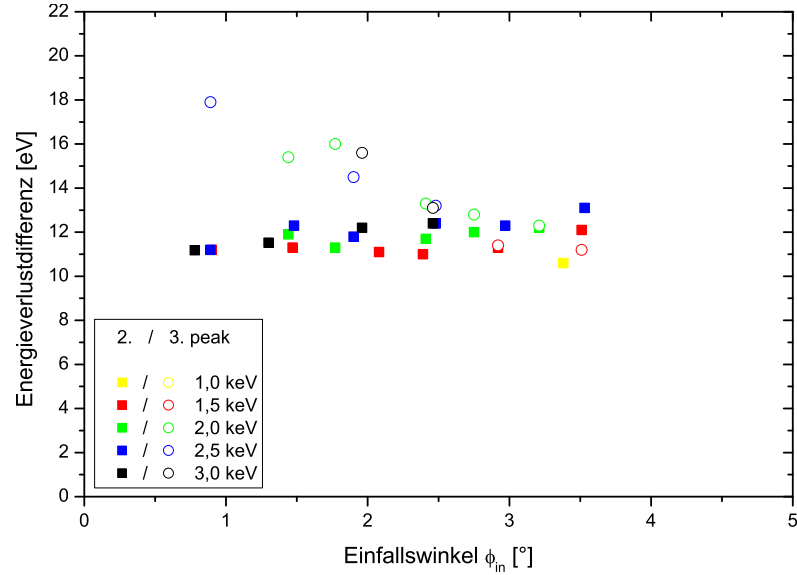


Abb. 4.34: Differenz der Energieverluste als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{in}$  für Anregung eines Exzitons (Quadrate) und für Anregung von zwei Exzitonen (Kreise) für die Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{SiO}/\text{Mo}(112)$

Die Ausbeuten für die Elektronen und die Exzitonen sind in den Abb. 4.35 und 4.36 dargestellt. Dabei ist zu sehen, dass es ähnliche Schwellen für die Elektronenemission wie für die Anregung von Exzitonen gibt. Beide Anregungen erfolgen bei 1 keV Projektilenergie (gelbe Symbole) erst beim größten Einfallswinkel. Insgesamt ist die Exzitonenausbeute bei ähnlicher Senkrechtenergie höher als die Elektronenausbeute.

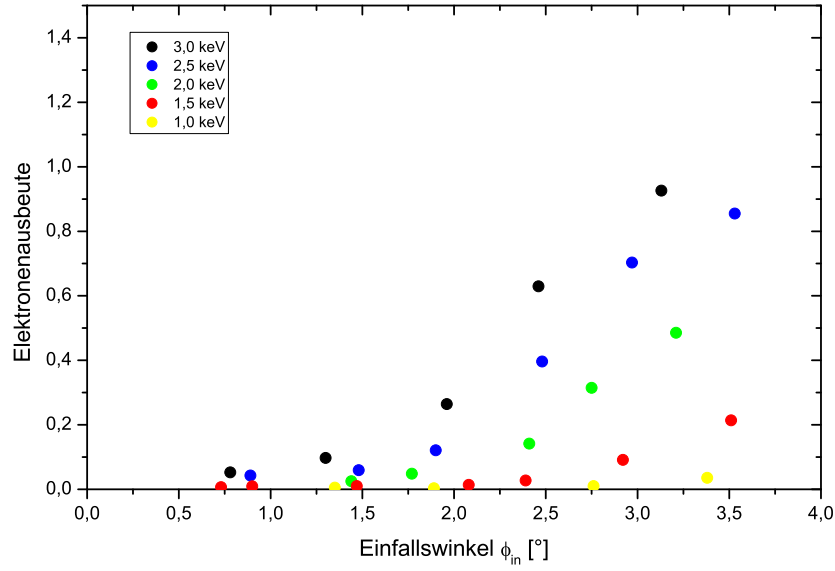


Abb. 4.35: Elektronenausbeute als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{in}$  für die Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{SiO}/\text{Mo}(112)$

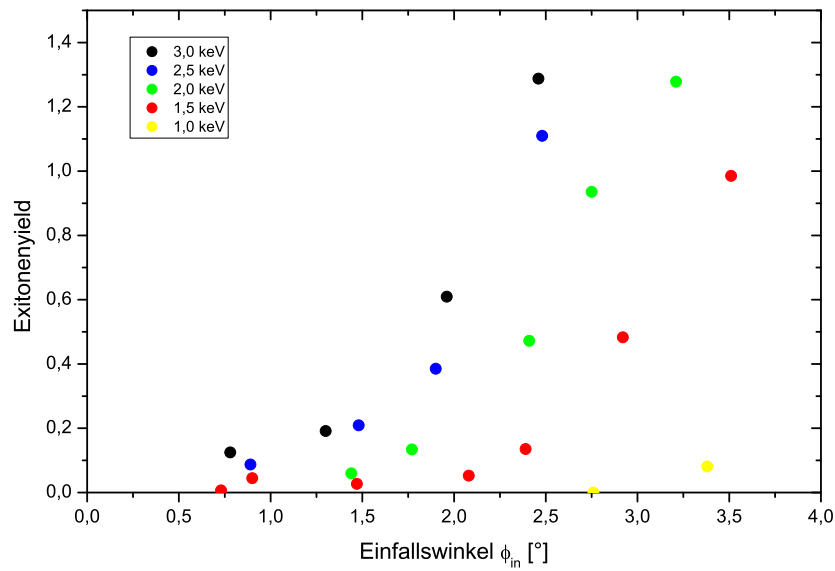


Abb. 4.36: Exzitonen ausbeute als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{in}$  für die Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{SiO}/\text{Mo}(112)$



# Kapitel 5

## Untersuchungen an NiAl(110) und Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) / NiAl(110)

Seit den ersten Publikationen im Jahr 1991 durch Jäger et al. [55] und im Jahr 1994 durch Libuda et al. [67] gibt der dünne auf NiAl(110) präparierte Aluminiumoxid-Film Anlass zu vielen Diskussionen. Trotz zahlreicher Untersuchungen konnte erst im Jahr 2005 in einer Arbeit von Kresse et al. [60] ein finaler Strukturvorschlag unterbreitet werden. Der Aluminafilm ist von außerordentlichem Interesse, weil die elektronischen Eigenschaften des Films, insbesondere die Bandlücke von etwa 7-8 eV [3, 99], sehr ähnlich den Eigenschaften eines Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> - Einkristalls sind [41]. Trotzdem lassen sich an dem Aluminafilm alle spektroskopischen Methoden der Oberflächenphysik (z.B. LEED, STM/STS, AES) nutzen, deren Verwendung an Isolatoreinkristallen schwierig bis unmöglich sind. Weitere positive Eigenschaften sind die wohldefinierte Dicke des Aluminafilms und seine geometrische Struktur.

Schon in den 1990er Jahren wurden durch verschiedene oberflächensensitive, spektroskopische Methoden [55, 67, 121] die grundsätzlichen Eigenschaften des Aluminafilms beschrieben. Der Film ist 5 Å dick, das entspricht zwei Atomlagen, und die Aluminium-Atome befinden sich nicht wie im  $\alpha$  - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [113] ausschließlich in den oktaedrischen Lücken des Sauerstoff-Gerüsts, sondern die Aluminium-Atome sind ähnlich wie in  $\gamma$  - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> [86] oder  $\kappa$  - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> tetraedrisch und oktaedrisch koordiniert.

## 5.1 Kristallprparation

### 5.1.1 NiAl(110)

NiAl ist eine der einfachen metallischen Legierungen und sie kristallisiert in CsCl-Struktur. Die Einheitszelle lsst sich also durch zwei gegeneinander versetzte einfache kubische Gitter beschreiben. Die Gitterkonstante von NiAl betrgt  $a_{\text{NiAl}}=2,89\text{\AA}$  [11, 40]. Im Vergleich dazu betrgt die Gitterkonstante von Nickel  $a_{\text{Ni}}=3,52\text{\AA}$  und die von Aluminium  $a_{\text{Al}}=4,05\text{\AA}$ . Die Einheitszelle der (110)-Oberflche ist ein Rechteck mit den Kantenlngen  $a_{\text{NiAl}}$  und  $\sqrt{2} a_{\text{NiAl}}$ . Der Netzebenenabstand betrgt  $a_{\text{NiAl}}/\sqrt{2}$ . In Abb. 5.1 ist diese Struktur dargestellt, auerdem wurden die Kristallrichtungen in die rechte Graphik eingezeichnet. Die Symmetrie der NiAl(110) - Oberflche ist zweizhlig, die Ionenstrahltriangulationskurve hat bei einer Darstellung von  $90^\circ$  (z.B. vom [10] bis [01]) keine weitere innere Symmetrie.

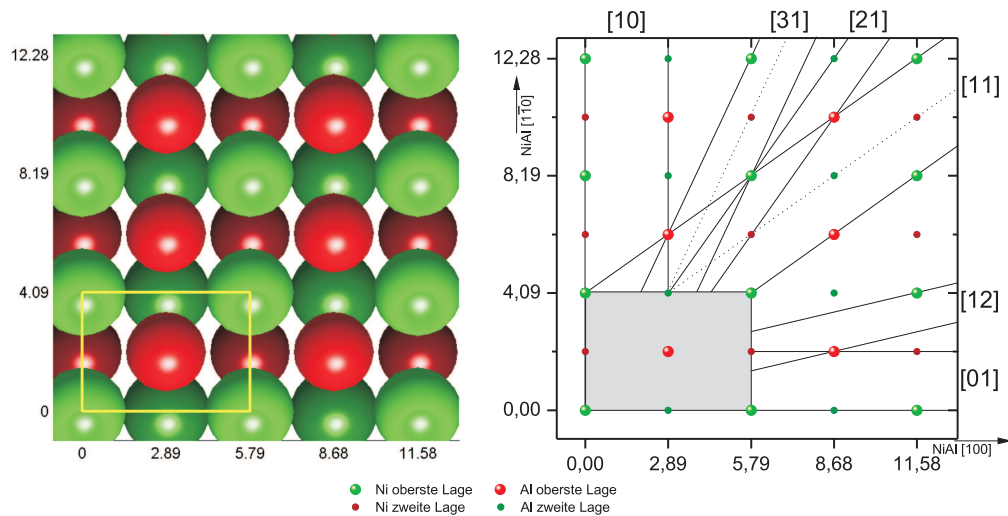


Abb. 5.1: Strukturmodell der (110)-Oberflche von NiAl, Abstnde in  $\text{\AA}$ , links: Kugelmodell der ersten und zweiten Netzebene, rechts: schematische Darstellung mit zustzlicher Kennzeichnung der niedrig indizierten Kristallrichtungen

Die Prparation des NiAl(110) - Kristalls wurde nach Rezepten und Methoden, die fr andere metallische Kristalle existieren, durchgefhrt [5, 122]. Die im Vergleich zu Aluminium oder Kupfer relativ hohe Ausheiltemperatur machte die Verwendung des in Kap. 2.2.1 vorgestellten Boralelectric-Heizers notwendig.



Der Kristall wurde nach dem Einbringen in die UHV-Kammer durch zyklisches Sputtern und Heizen präpariert. Dafür wurde der Kristall unter einem flachen Einfallswinkel von  $\phi_{\text{in}} \approx 2^\circ$  mit 100 keV  $\text{Ar}^+$  - Ionen beschossen. Der Strom der  $\text{Ar}^+$  - Ionen beträgt dabei etwa  $2 \mu\text{A}$ . Diesen Ionen wird die Oberfläche, je nach Präparationszustand, bis zu 2 Stunden je Zyklus ausgesetzt. Anschließend wird der Kristall innerhalb einer Stunde auf 1000 K geheizt, dort etwa 30 s belassen und wieder abgekühlt. Die Kontrolle des Präparationszustandes erfolgt durch die Aufnahme von winkelaufgelösten Streuverteilungen der am Target gestreuten Atome (s. Kap. 2.3.1).

In der Literatur wird beschrieben, dass allein durch das Heizen des Kristalls auf 1110 K die Oberfläche hinreichend präpariert werden kann. Diese Methode führte, aufgrund von verbleibenden Kohlenstoffverunreinigungen, zu nicht hinreichend gut präparierten Oberflächen.

### 5.1.2 Alumina auf NiAl(110)

Zur Präparation des Alumina-Films wird wie folgt vorgegangen [55, 67]. Der nach dem Sputtern ausgeheilte NiAl-Kristall wird auf 540 K abgekühlt, die Oberfläche wird bei dieser Temperatur durch Sauerstoffexposition ( $\text{O}_2$ ) bei einem Druck von ca.  $5 \cdot 10^{-6}$  mbar 15 Minuten lang oxidiert (1200 Langmuir). Dabei entsteht ein ungeordneter Aluminiumoxidfilm. Dieser wird anschließend für 5 min bei 1200 K ausgeheilt<sup>1</sup>. Die von Kresse et al. vorgeschlagene Struktur des entstandenen Oxidfilms ist in Abb. 5.2 als Kugelmodell dargestellt [60].

Kontrolliert wird die Qualität des Oxidfilms zunächst durch eine chemische Analyse mittels Auger-Elektronen-Spektroskopie und durch die Untersuchung der strukturellen Eigenschaften mittels LEED. In den Abb. 5.3 und 5.4 sind jeweils die Ergebnisse der Untersuchungen an  $\text{Al}_2\text{O}_3$  /NiAl(110) (unten) und zum Vergleich ein Beispiel für eine Untersuchung an NiAl(110) (oben) dargestellt. In Abb. 5.3 (unten) ist das aus der Literatur [55, 67] bekannte LEED-Bild für den Alumina-Film zu erkennen. Das Auger-Elektronen-Spektrum für den Alumina-Film zeigt im Vergleich zum Spektrum des sauberen NiAl(110) zusätzlich zu den Linien für Nickel und Aluminium die Linien des Sauerstoffs bei etwa 500 eV. Beide Spektren zeigen keine Verunreinigung durch Kohlenstoff (272 eV).

Diese beiden Analysemethoden werden standardmäßig durchgeführt, sie sind aber für das Regime der streifenden Streuung nicht empfindlich genug.

---

<sup>1</sup>alle in diesem Abschnitt beschriebenen Heiz- und Abkühlprozesse werden langsam durchgeführt, d.h. etwa  $\pm 50 \text{ K min}^{-1}$

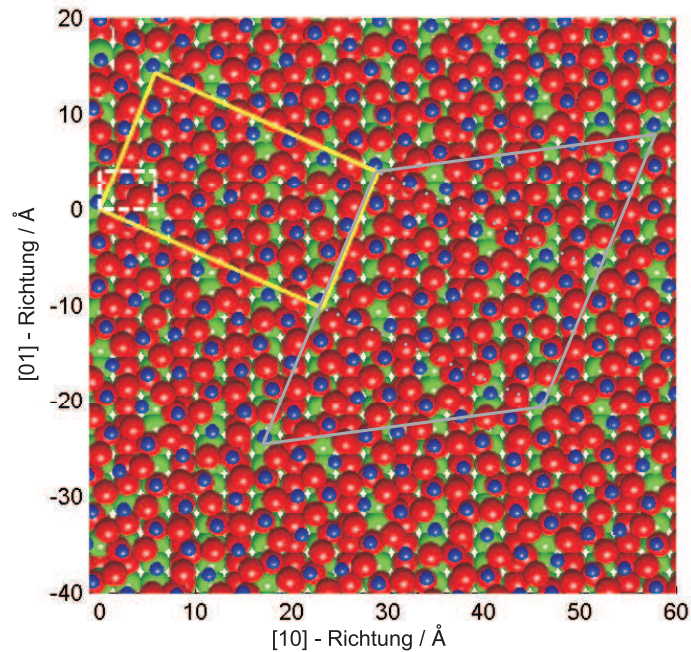


Abb. 5.2: Strukturmodell von Kresse et al. [60], gestricheltes weißes Rechteck: Elementarzelle von NiAl(110), graue Route: Daten für Alumina Film aus [60], gelbes Rechteck: Einheitszelle des Alumina Films, grün: Nickel, rot: Aluminium, blau: Sauerstoff

Schon kleinste Mengen von Adatomen führen aufgrund der langen Trajektorien der Projektile vor der Oberfläche zu Großwinkelstößen, verbunden mit einer effizienteren Elektronenemission, die die Untersuchungen erschweren. Adatome, die sich unkorreliert auf der Oberfläche befinden, können in LEED-Aufnahmen nur durch den Anstieg der Intensität des Untergrund im Vergleich zu den Beugungsmaxima nachgewiesen werden. Auch mit der Auger-Elektronen-Spektroskopie können geringe Verunreinigungen ( $<1\%$ ) mit dem in dieser Arbeit benutzten Aufbau nicht nachgewiesen werden. Aus diesem Grund werden Winkelverteilungen der gestreuten Projektile aufgenommen (vgl. Kap. 2.3.1). Diese Streuverteilungen sind extrem sensitiv auf die Güte der obersten Atomlage (Abwesenheit von Stufen) und auch auf Fremdatome (z.B. Kohlenstoff- oder Sauerstoffadatome). In Abb. 5.5 sind Streuverteilungen für die Streuung von 30 keV H an NiAl(110) (rote Kurve) und an Alumina/NiAl(110) (blaue Kurve) in einem Diagramm dargestellt. Die Winkelverteilung für die Streuung am Oxid ist breiter als jene für die Streuung am NiAl(110), diese Verbreiterung ist jedoch akzeptabel. Der Oxidfilm

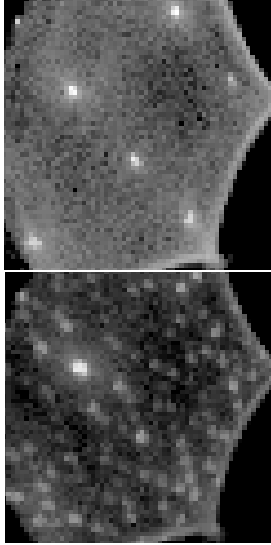


Abb. 5.3: LEED an NiAl(110) (oben) und  $\text{Al}_2\text{O}_3$  /NiAl(110) (unten),  $E_{\text{Elektron}}=60.4$  eV

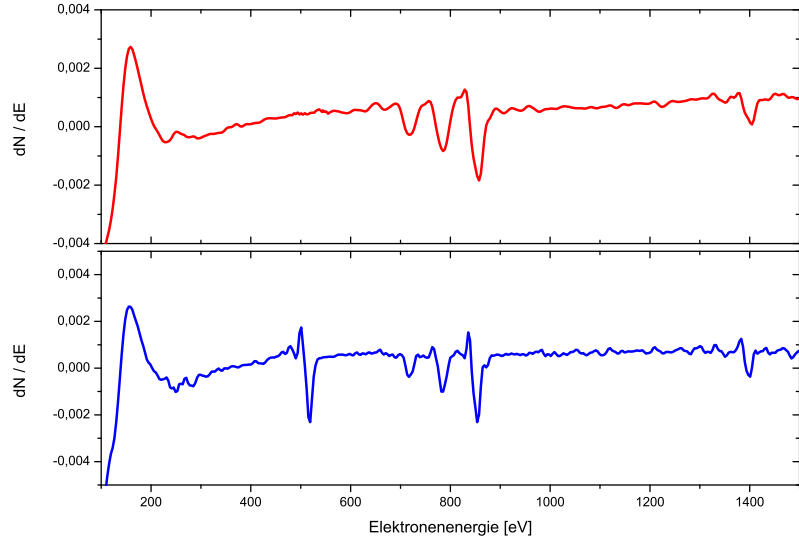


Abb. 5.4: AES an NiAl(110) (oben) und  $\text{Al}_2\text{O}_3$  /NiAl(110) (unten),  $E_{\text{Elektron}}=4$  keV

muss also sehr gut geordnet auf dem Metall gewachsen sein. Anhand solcher Winkelverteilungen wird vor jedem Messtag die Qualität der Oberflächen routinemäßig überwacht.

Die Oxidstruktur wächst kommensurabel entlang der  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ -Richtung des NiAl aber inkommensurabel entlang der  $\langle 001 \rangle$ -Richtung. Aufgrund der Zweizähligkeit der NiAl(110)-Fläche, wachsen zwei Domänen. Diese sind um  $\pm 24^\circ$  um die  $\langle 1\bar{1}0 \rangle$ -Achse der NiAl-Einheitszelle verdreht. Beschrieben wird der Aluminafilm von Kresse et al. [60] als Parallelogramm (grau in Abb. 5.2), welches zwei Einheitszellen enthält und durch die Vektoren  $(5,1)a$  und  $(2,7)a$  begrenzt wird. Eine Einheitszelle des Aluminafilms (gelb in Abb. 5.2) wird dann von den NiAl-Einheitsvektoren  $\frac{1}{2}(2,7)a$  und  $\frac{1}{2}(8,-5)a$  aufgespannt<sup>2</sup>, das entspricht  $17,90 \text{ \AA} \times 10,93 \text{ \AA}$  mit einem Innenwinkel  $\gamma$  von  $91,84^\circ$  [60]. In Abb. 5.2 ist der Strukturvorschlag von Kresse et al. nur für eine Domäne gezeichnet, außerdem sind die Einheitszellen für NiAl(110) (weiß) und den Aluminafilm (gelb) markiert.

<sup>2</sup>an der Position (0,0) in der obersten Lage des NiAl befindet sich ein Ni-Atom

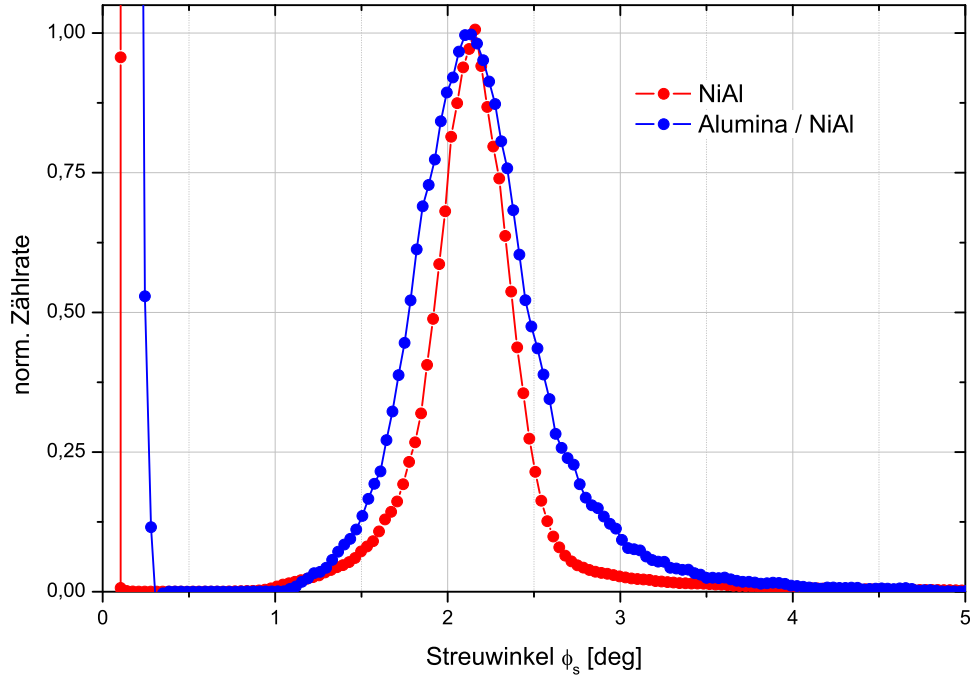


Abb. 5.5: Streuverteilung bei der Streuung von 30 keV H an NiAl(110) und  $\text{Al}_2\text{O}_3$  / NiAl ,  $\phi_{\text{in}}=1,05^\circ$

## 5.2 Ionenstrahltriangulation

Motivation für die Experimente am NiAl(110) war die Verifizierung des Strukturvorschlags von Kresse et al. [60] für den Aluminafilm. In Abb. 5.6 sind die Ionenstrahltriangulationskurven für die Streuung von 150 keV  $\text{H}^0$  an NiAl(110) (rot) und an  $\text{Al}_2\text{O}_3$  / NiAl (blau) dargestellt.

Die Ionenstrahltriangulationskurve für die Streuung an NiAl(110) kann durch die in Kap. 4.2 vorgestellten Methoden simuliert werden. Die Hauptminima der Ionenstrahltriangulationskurve, die am Aluminafilm gemessen wurde, treten an den gleichen Stellen auf wie jene für die Streuung am sauberen NiAl. Die Minima für die breiten Kristallkanäle ([10], [31] und [11]) können in den Simulationen für die Streuung am  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) nicht nachvollzogen werden. In Abb. 5.7 ist deshalb zur Illustration die Oberfläche aus der „Sicht“ der streuenden Projektile für vier Kristallrichtungen dargestellt. Auf der linken Seite der Abbildung ist die geometrische Struktur von NiAl(110) und auf der rechten Seite diejenige vom Aluminafilm darge-

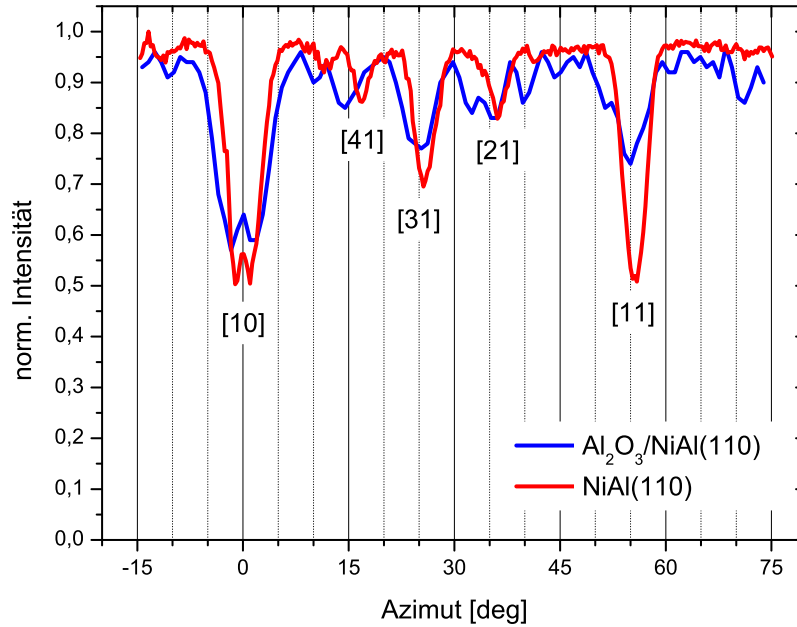


Abb. 5.6: Ionenstrahltriangulationskurve für die Streuung von 150 keV  $H^0$  an NiAl(110) (rot) und an  $Al_2O_3$  / NiAl (blau), Einfallswinkel  $\phi_{in} = 1,2^\circ$

stellt. Für die [10] und die [11] - Richtung am sauberen NiAl sind die breiten Kanäle deutlich zu erkennen, in der [31]-Richtung sind die Kanäle im Vergleich dazu viel schmäler. Trotzdem tritt in der Messkurve in Abb. 5.6 der [31]-Kanal prominent auf<sup>3</sup>. Im Gegensatz dazu sind für die entsprechenden Richtungen in Abb. 5.7 auf dem Aluminafilm (rechts) keine Kanäle zu erkennen, obwohl in der Ionenstrahltriangulationskurve für  $Al_2O_3(0001)$  gerade die breiten Kanäle ähnlich ausgeprägt sind, wie für die Streuung am sauberen NiAl. Die Korrugation der obersten Atomlage des Oxidfilms ist nicht wie beim NiAl translationssymmetrisch (in der Zeichenebene). Außerdem täuscht die Darstellung über die Tiefe der Kanäle, es wurde ein endlicher Ausschnitt der Oberfläche gezeichnet, die in der Abbildung sichtbare „Korrugation“ bestimmt sich daher nur aus den interatomaren Lücken.

Für ein Projektil, welches über etwa 50 Atome innerhalb des Abstandes von 1 Å senkrecht zur Oberfläche fliegt, sind diese Bereiche viel zu kurz, um der Oberfläche näher als in einer zufälligen Richtung zu kommen. Für die

<sup>3</sup>bei rechteckiger Elementarzelle sind die gradzahligen Richtungen ([21], [41], ...) im Vergleich zu den ungradzahligen unterdrückt, vgl. Abb. 5.1 (rechts)

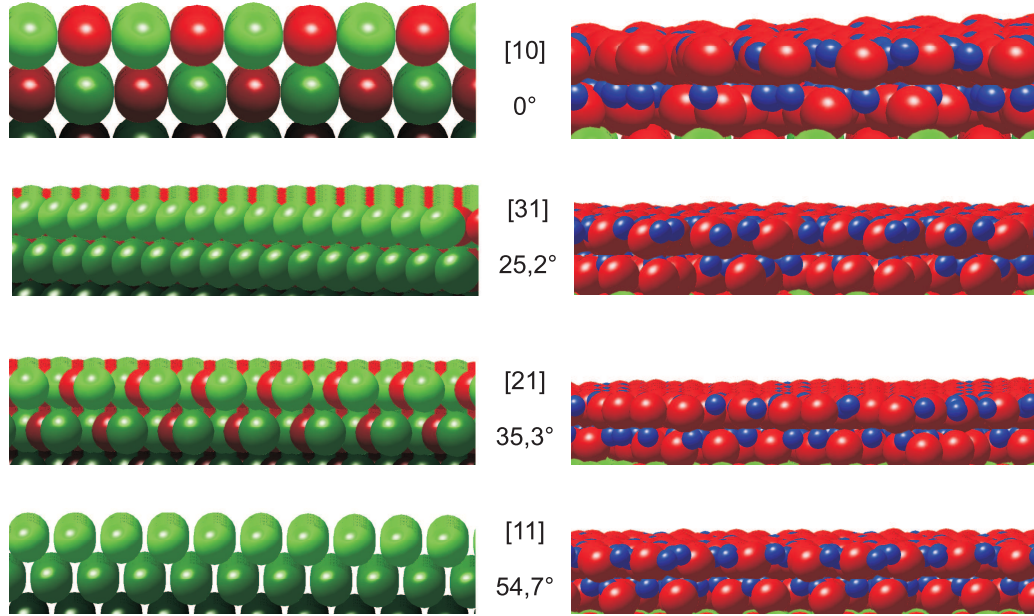


Abb. 5.7: Blick aus Richtung der Projektile entlang niedrig indizierter Richtungen für NiAl(110) (links) und das Strukturmodell von Kresse et al. (rechts), der Einfalls- bzw. Blickwinkel beträgt  $\phi_{\text{in}} = 2,0^\circ$

Streuung von Projektilen an einer Oberfläche die dem Modell von Kresse et al. entspricht, kann mit den an den Metalloberflächen erprobten Methoden keine Ionenstrahltriangulationskurven erzeugt werden, die den Strukturen des Strukturvorschlags von Kresse et al. entsprechen. Die hellblaue Kurve in Abb. 5.8 ist ein Beispiel für eine solche Ionenstrahltriangulationskurve. Es wurden die gleichen Parameter wie für die Simulation der NiAl-Kurve (rote Kurve) verwendet. Die Projektile dringen in allen azimuthalen Richtungen mit ähnlicher Wahrscheinlichkeit in den Kristall ein oder sie stoßen mit einzelnen Atomen und werden dann erratisch in alle Raumrichtungen gestreut. Die blaue Kurve in Abb. 5.8 repräsentiert eine Simulation, in welcher die Aluminaschicht lediglich als Filter für die einfallenden Projektile gewirkt hat. Außerdem wurden in dieser Simulation alle unterhalb der Oxidschicht ausgelösten Elektronen detektiert, eine Abschwächung auf dem Weg durch die Aluminaschicht wurde nicht berücksichtigt. Diese Ionenstrahltriangulationskurve zeigt die Hauptrichtungen [10] und [11], außerdem tritt bei  $\theta \approx 61^\circ$  ein neuer prominenter Kanal auf, dieser Kanal hat in den Experimenten keine Entsprechung.

In Abb. 5.9 sind die Atompositionen des Strukturmodells von Kresse et al.

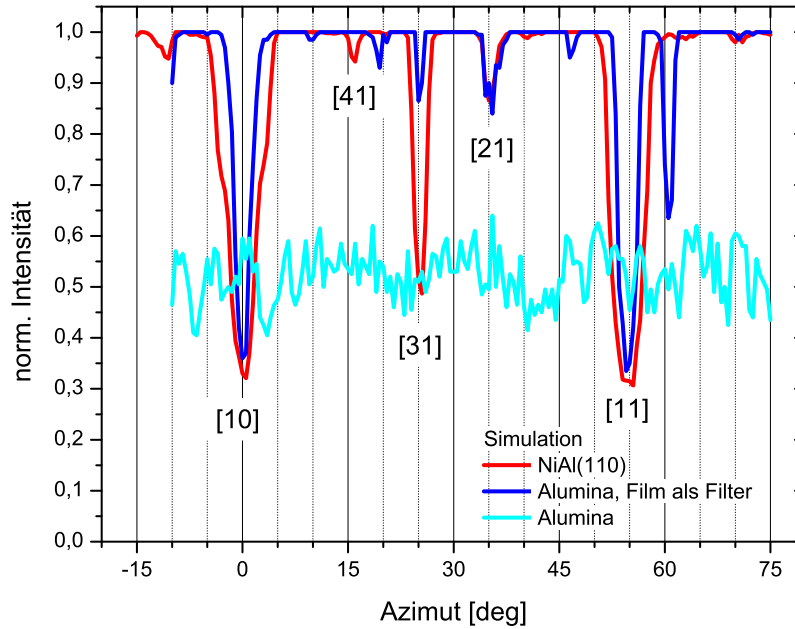


Abb. 5.8: Simulationen

dargestellt. Dabei wurde das Koordinatensystem um  $66,2^\circ$  verdreht, sodass eine Hauptrichtung der Einheitszelle des Aluminafilms senkrecht zur Zeichenebene liegt (siehe Teilbild d). Der Grund für diese Darstellung sind die in (b) sichtbaren Kanäle, die jedoch, wie in (c) zu erkennen ist, nicht zu einer Korrugation an der Oberfläche führen. Um die Täuschung des Auges durch die Farbgebung zu verhindern, ist jeweils rechts eine Kopie der entsprechenden Grafik gezeigt, bei der alle Atome in Größe und Farbe gleich dargestellt wurden. Im Vergleich zu (d) wurden in (c) alle Atome gleich groß dargestellt, dadurch ist zu erkennen, wie stark sich die Atome des Oxids an den [10]-Ketten des NiAl-Substrates lokalisieren. In der [10]-Richtung des NiAl sind jedoch visuell auf dem Aluminafilm keine Richtungen zu erkennen. Diese sind nur entlang der Kanten der Einheitszelle des Aluminafilms zu sehen.

Die Existenz der zweiten Domäne wurde bei allen hier vorgestellten Überlegungen berücksichtigt, insbesondere wurden entsprechende Ionenstrahltriangulationskurven durch Spiegelung an der [01]-Richtung des NiAl erzeugt und mit denen der ersten Domäne überlagert. Die Ergebnisse sind nicht aufschlussreicher als die in Abb. 5.8 präsentierten Ionenstrahltriangulationskurven.



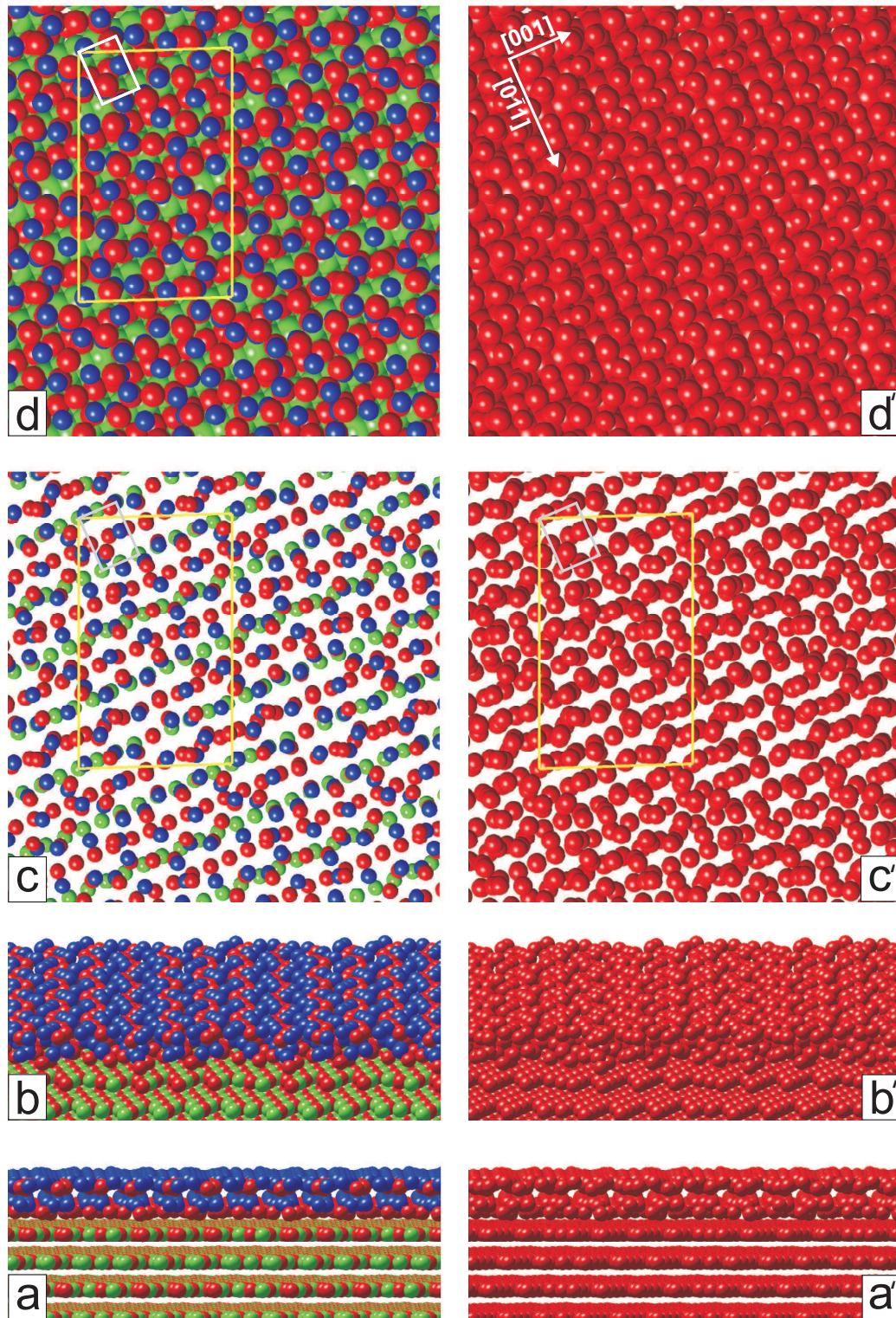


Abb. 5.9: Strukturmodell von Kresse et al, um  $66.2^\circ$  verdreht, grün: Nickel, rot: Aluminium, blau: Sauerstoff, a und a':  $\phi_{\text{in}}=0,0^\circ$ , b und b':  $\phi_{\text{in}}=10,0^\circ$ , c und c': Draufsicht, alle Atome gleich groß, d und d': Draufsicht



In den Simulationen konnten die Domänengrenzen selbst nicht berücksichtigt werden. Deren Auswirkung auf die Ionenstrahltriangulationskurven sollte jedoch in einer Erhöhung des Signaluntergrundes und nicht in der Ausbildung von neuen Kristallrichtungen resultieren.

Zusammenfassend bleibt festzustellen, dass es nicht möglich war, das Strukturmodell von Kresse et al. mit Methoden der Ionenstrahltriangulation zu bestätigen. Ein entscheidender Grund können die Simulationen ohne die speziellen Wechselwirkungspotentiale für die Atome in der Oxidschicht sein. Die Wechselwirkungspotentiale, die für die Berechnung der Trajektorien bei der Streuung an Metalloberflächen benutzt werden, sind etabliert und führen zu guten Übereinstimmungen mit dem Experiment. Ausgehend vom Vergleich der experimentellen Ionenstrahltriangulationskurven für die Streuung an NiAl(110) und  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) wurde in den Simulationen versucht, den Einfluss der Oxidschicht auf die Ionenstrahltriangulationskurven möglichst gering zu halten. In den Simulationen wurde eine Lokalisierung der Elektronen in der Oxidschicht an den Atomrümpfen berücksichtigt. Außerdem wurde versucht, die Oxidschicht als eine für die Elektronenemission passive Schicht zu beschreiben, und nur die Streuung der Projektile an den Atomen in der Oxidschicht zu berücksichtigen. Auch die Auswertung der Trajektorien mittels des „Eindringkriteriums“ führte zu keinem Erfolg. Bei dieser Methode ist es möglich, die Oxidschicht schrittweise, also durch schrittweise Verringerung der Elektronenproduktionsrate in der Alumina-Schicht, passiver werden zu lassen.

### 5.3 Schwelle der Elektronenemission für die Streuung von $\text{He}^0$ an $\text{NiAl}(110)$

Bevor die Studien zur ioneninduzierten Elektronenemission am Aluminafilm auf  $\text{NiAl}$  vorgestellt werden, sollen einige grundlegende Experimente zur Elektronenemission am sauberen  $\text{NiAl}(110)$  beschrieben werden. Als Beispiel dient die  $\text{He}^0$ -Streuung unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 1,2^\circ$  an  $\text{NiAl}(110)$ . In Abb. 5.10 sind Ergebnisse von Experimenten dargestellt.

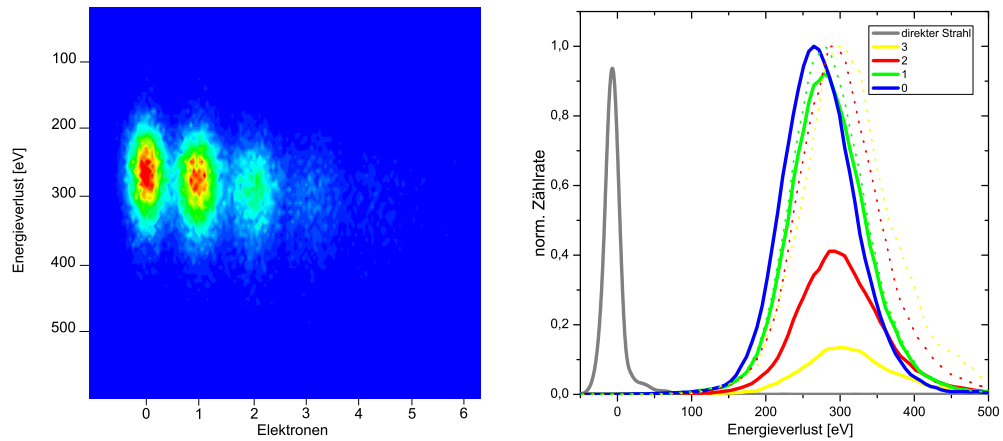


Abb. 5.10: 2-dim Darstellung von Energieverlust und Elektronenausbeute bei der Streuung von 10 keV  $\text{He}^0$  unter  $\phi_{\text{in}} = 1,20^\circ$  an  $\text{NiAl}(110)$

Die linke Graphik zeigt in 2 dim. Darstellung (Farbskala) die Anzahl emittierter Elektronen und des Energieverlustes der Projektile. Es lässt sich der Energieverlust für die Streuprozesse mit und ohne Elektronenemission ablesen. Für die rechte Darstellung wurden die Energieverlustverteilungen für die Emission von keinem (blau), einem (grün), zwei (rot) und drei (gelb) Elektronen dargestellt. Dazu wurde das zweidimensionale Datenfeld jeweils zwischen den entsprechenden Elektronenkanälen separiert, die Intensität innerhalb der entstandenen Kästen aufsummiert und als Funktion des Energieverlustes dargestellt. Die durchgezogenen Kurven geben die echten Intensitätsunterschiede der Streuprozesse wieder, aus ihnen lässt sich die Elektronenausbeute pro Projektil berechnen. Die gepunkteten Linien zeigen normierte Intensitäten. Hier kann deutlich die jeweils für die Emission eines weiteren Elektrons nötige Energie abgelesen werden. In diesem Beispiel sind das ca. 9,5 eV pro emit-

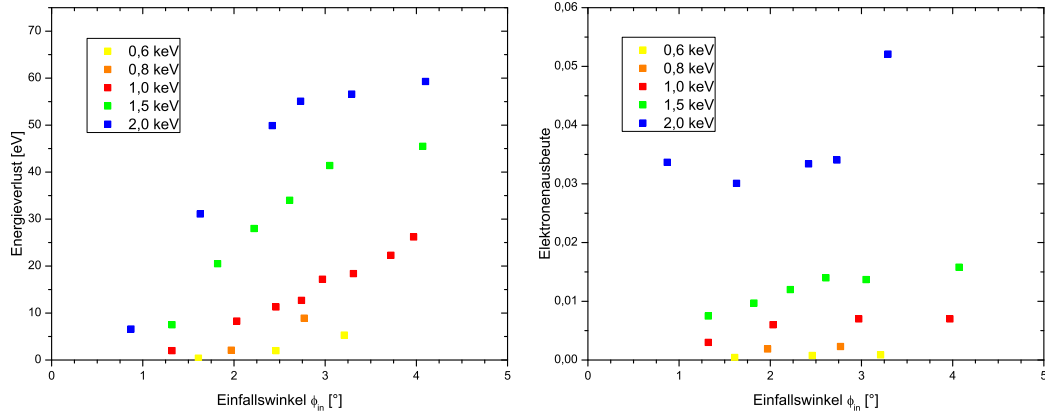


Abb. 5.11: Energieverlust der Projektile (links) und Elektronenemissionsausbeute (rechts) für die Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{NiAl}(110)$  als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{in}$  für Projektilenergien von 0,6 keV bis 2,0 keV

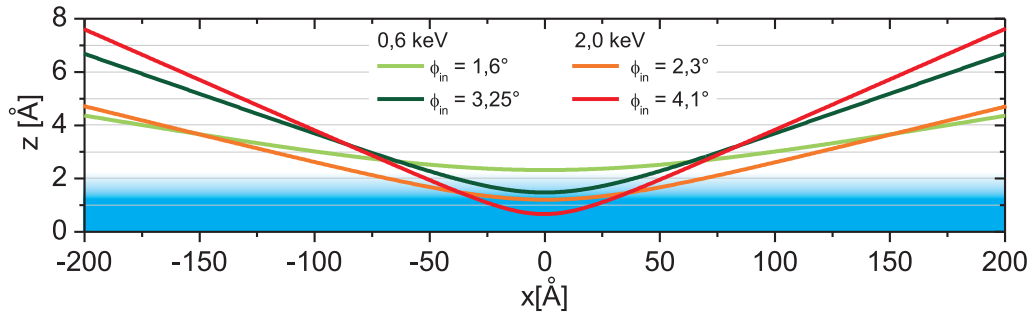


Abb. 5.12: Trajektorien der  $\text{He}^0$ -Projektile für Projektilenergien 0,6 keV und 2,0 keV bei der Streuung an  $\text{NiAl}(110)$  unter verschiedenen Einfallswinkeln  $\phi_{in}$

tiertem Elektron. Die Elektronenausbeute beträgt unter diesen Bedingungen 1,3 Elektronen pro gestreutem  $\text{He}$ -Projektil.

In Abb. 5.11 sind der Energieverlust der Projektile, die keine Elektronen ausgelöst haben (links), und die Elektronenausbeute (rechts) für die Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{NiAl}(110)$  als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{in}$  für Projektilenergien von 0,6 keV bis 2,0 keV dargestellt. Interessant sind die sehr geringen Energieverluste ( $< 1\text{ eV}$ ) für Projektile mit kleiner Senkrechterenergie, also kleiner Projektilenergie und flachem Einfallswinkel. Der Energieverlust steigt dann für die jeweilige Projektilenergie linear mit dem Einfallswinkel an. Erst bei relativ großen Senkrechteregien (Projektilenergie  $> 1,5\text{ keV}$  und  $\phi_{in} > 3^\circ$ ) wird eine Sättigung erreicht. Zur Erklärung dieser Abhängigkeit kann der Energieverlust der Projektile als Abbremsen der Projektile im Elektronengas

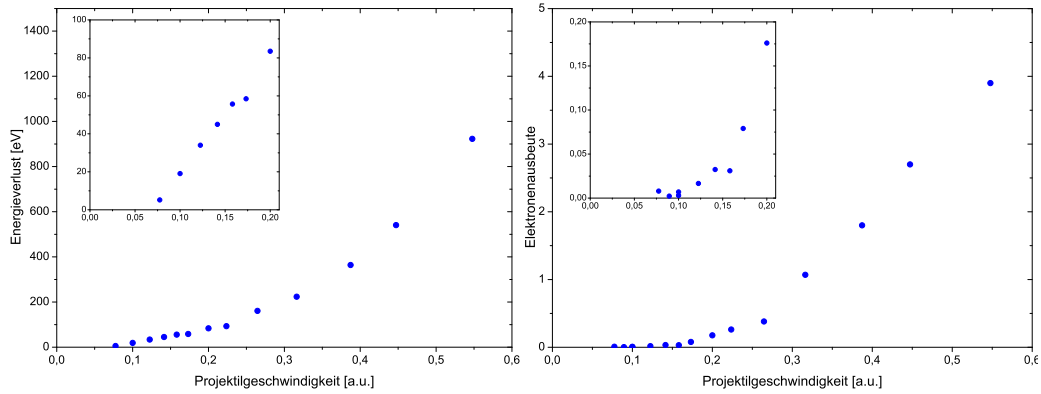


Abb. 5.13: Energieverlust und Elektronenausbeute für die Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{NiAl}(110)$  als Funktion der Projektilgeschwindigkeit, bei konstanter Senkrechtenergie  $E_{\perp} = 3 \text{ eV}$

beschrieben werden. Die sehr kleinen Energieverluste für die Projektile mit kleiner Senkrechtenergie kommen zustande, weil die Projektile aufgrund der geringen Senkrechtenergie nicht nah genug an die Oberfläche herankommen (s. Abb. 5.12). Der minimale Abstand zur Oberfläche beträgt für 600 eV  $\text{He}^0$  bei der Streuung an  $\text{NiAl}(110)$  unter  $\phi_{\text{in}} = 1,6^\circ$  etwa  $z_{\text{min}} = 2,3 \text{ \AA}$ . In diesem Bereich ist die Elektronendichte so gering, dass die Streuung des Projektils an Elektronen sehr unwahrscheinlich ist. Somit verliert das Projektil wenig Energie durch diese Stöße. Bei ebenfalls 600 eV Projektilenergie unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 3,25^\circ$  kommt das He-Atom schon bis auf  $z_{\text{min}} = 1,5 \text{ \AA}$  an die Oberfläche heran. Der Energieverlust für diese Streuprozesse beträgt etwa 5 eV, die Elektronendichte ist in diesem Bereich bedeutend größer.  $\text{He}^0$ -Projektile die mit 2,0 kV beschleunigt wurden und unter  $\phi_{\text{in}} = 2,3^\circ$  am  $\text{NiAl}$ -Kristall gestreut werden, haben einen minimalen Abstand von  $z_{\text{min}} = 1,2 \text{ \AA}$ .

Die in der rechten Graphik in Abb. 5.11 dargestellten Elektronenausbeuten steigen mit wachsender Projektilenergie an. Bei 600 eV Projektilenergie werden keine Elektronen ausgelöst, bei 2 keV Projektilenergie löst etwa jedes 25te  $\text{He}^0$ -Projektil ein Elektron aus. Im Vergleich zum Energieverlust ist die Abhängigkeit der Elektronenausbeute vom Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}}$  nur schwach ausgeprägt.

In Abb. 5.13 wurden der Energieverlust und die Elektronenausbeute bei der Streuung von  $\text{He}^0$ -Projektile als Funktion der Geschwindigkeit der Projektile dargestellt. Dabei wurde die Senkrechtkomponente der Energie auf  $E_{\perp} = 3 \text{ eV}$  konstant gehalten. Der Energieverlust steigt für kleine Geschwindigkeiten linear mit der Projektilgeschwindigkeit an, erst für Projektilgeschwindigkeiten  $v > 0,25 \text{ a.u.}$  steigt der Energieverlust stärker an.

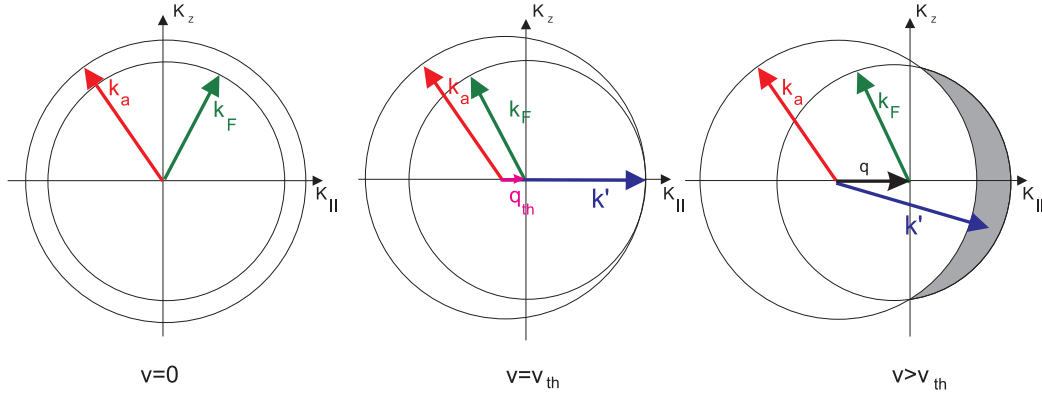


Abb. 5.14: Schnitte durch Fermikugel für Projektilgeschwindigkeit  $v=0$ ,  $v=v_{th}$  und  $v>v_{th}$

Für die kinetische Elektronenemission existiert eine Schwelle [6]. Die Valenzelektronen eines Metalls lassen sich als freies Elektronengas beschreiben. Die Elektronenanregung ist in diesem Modell eine Konsequenz aus der Wechselwirkung zwischen dem geschirmten Coulombpotential des Projektils und den Elektronen des Targets durch binäre Stöße.

Die Schwellengeschwindigkeit  $v_{th}$  für die Emission eines Elektrons in das Vakuum-Niveau ergibt sich, wenn die kinetische Energie des Projektils, die auf die freien Elektronen im Fermi-Niveau übertragen wird, der Austrittsarbeit  $W$  entspricht.

$$W = 2 m_e v_{th} ( v_F + v_{th} ) \quad (5.1)$$

$$v_{th} = \frac{v_F}{2} \left[ \left( 1 + \frac{W}{E_F} \right)^{1/2} - 1 \right] \quad (5.2)$$

Das Schwellenverhalten der Elektronenausbeute hängt ursächlich mit den direkten, binären Stößen zwischen Projektil und Targetelektronen zusammen. Der Impuls eines Projektils der Masse  $M$  ist  $M \vec{v} = M (v_{||}, v_z) \approx M(v_{||}, 0)$ , der eines Elektrons ist  $\vec{k} = (k_{||}, k_z)$ . Weil die Masse  $m_e$  sehr viel kleiner als  $M$  ist ( $\frac{m_e}{M} \ll 1$ ), gilt für den Impuls nach dem Stoß:

$$\vec{k}' = (-k_{||}, k_z) + \vec{q} \quad \text{mit} \quad \vec{q} = 2m_e(v, 0) \quad . \quad (5.3)$$

Die dynamischen Effekte des resonanten Ladungstransfers bei streifender

Streuung an Oberflächen können durch das Konzept der „verschobenen Fermi-Kugel“ veranschaulicht werden [122]. Vor allem der Einfluss der Parallelgeschwindigkeit kann auf diese Weise dargestellt werden. Die Dichte der besetzten elektronischen Zustände in einem Freien-Elektronengas-Metall wird durch die Fermi-Kugel mit dem Radius  $k_F$  repräsentiert. In Abb. (5.14, links) ist ein Schnitt durch eine Fermi-Kugel gezeichnet. Der Radius, er wird auch Fermi-Impuls genannt, ist grün gefärbt. Der äußere Kreis mit dem Radius  $k_a$  (rot) illustriert die Grenze zum Vakuum-Niveau. Die Differenz zwischen  $k_a$  und  $k_F$  wäre also aufzubringen, um ein Elektron an der Fermikante auszulösen.

Elektronen, die sich innerhalb der Fermikugel befinden, können in das Vakuum-Niveau emittiert werden, wenn sie folgende Beziehung erfüllen:

$$\frac{\vec{k}'^2}{2m_e} = \frac{(\vec{k}_F + \vec{q})^2}{2m_e} \geq E_F + W \quad (5.4)$$

Es existiert also ein Impuls  $q_{th} = 2 m_e v_{th}$  (mit  $v_{th}$  aus Gl. 5.2), der für die Emission eines Elektrons in das Vakuum-Niveau mindestens nötig ist (Abb. 5.14, Mitte).

Bei dem Stoß wird ein maximaler Energieübertrag erreicht, wenn das Elektron in die Richtung emittiert wird, in der das Projektil das Target verlässt. Die Elektronen, die das Target verlassen, erfüllen deshalb die Beziehung:

$$|\vec{k}'| \geq k_F + q_{th} \quad (5.5)$$

Die graue Fläche in (Abb. 5.14, rechts) repräsentiert die von Elektronen besetzten Zustände des Phasenraums. Im Impulsraum entspricht diese Fläche der Volumendifferenz zweier Kugelkappen. Die Volumendifferenz kann nach

$$u = \frac{q - q_{th}}{q_{th}} \quad (5.6)$$

entwickelt werden [63, 124]:

$$\begin{aligned} V_D = \pi q_{th} [ & k_F(q_{th} + k_F)u^2 - \left( k_F(q_{th} + k_F) + \frac{q_{th}^2}{3} \right) u^3 \\ & + \frac{(q_{th} + 2k_F)^2}{2} u^4 \\ & + O(u^5) ] \end{aligned} \quad (5.7)$$

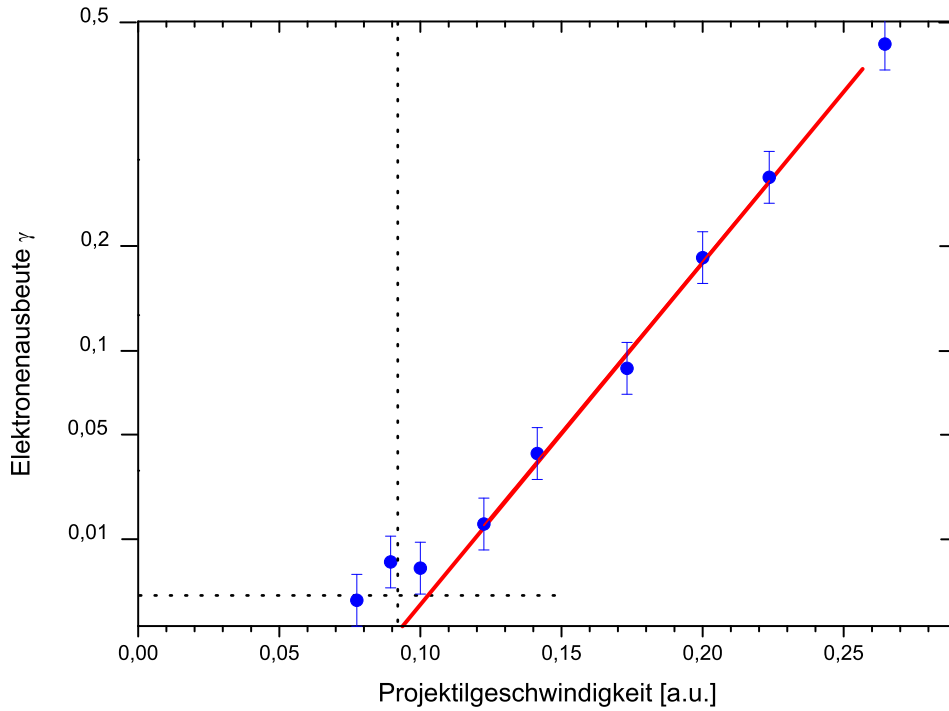


Abb. 5.15: Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{NiAl}(110)$  : Elektronenausbeute  $\gamma$  als Funktion der Projektilgeschwindigkeit und bei konstanter Senkrechtenergie  $E_{\perp}=3\text{eV}$ , aufgetragen an eine Wurzelskala, rote Gerade: Anpassung von Gleichung 5.8 an die Daten

Wesentlich ist das Fehlen eines linearen Terms und deshalb die quadratische Abhängigkeit der kinetischen Elektronenausbeute für kleine  $u$ . Dieses Modell beschreibt die funktionale Abhängigkeit der Elektronenausbeute an der Schwelle, es macht aber keine Aussagen über den Emissionsprozess selbst.

Aus Gleichung 5.7 kann für die kinetische Elektronenausbeute in Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit folgender Ausdruck gewonnen und zur Anpassung der experimentellen Daten genutzt werden:

$$\gamma = 4a\pi m_e^3 \left( v_F + \frac{v_F^2}{v_{th}} \right) (v - v_{th})^2 \quad (5.8)$$

( $a$  ist ein Proportionalitätsfaktor,  $v_{th}$  ist der Fitparameter)

Durch die Anpassung einer Geraden an die in Abhängigkeit von der Projektilgeschwindigkeit aufgetragene Wurzel der Elektronenausbeute  $\gamma$  lässt sich nach Gleichung 5.8 die Schwellgeschwindigkeit  $v_{th}$  aus den gezeigten Daten

bestimmen. Die experimentelle Schwellgeschwindigkeit  $v_{\text{th}}^{\text{exp}}$  ergibt sich nach Berücksichtigung eines Untergrundes von Elektronenausbeute  $\gamma = 0,001$  (horizontale gepunktete Linie in Abb. 5.15)<sup>4</sup> und ist etwas größer als die nach Gl. 5.2 berechnete theoretische Schwellgeschwindigkeit  $v_{\text{th}}^{\text{theo}}$  :

$$v_{\text{th}}^{\text{exp}} = (0,101 \pm 0,006) \text{ au} \quad \text{und} \quad v_{\text{th}}^{\text{theo}} = 0,092 \text{ au} \quad (5.9)$$

Der Grund für diese Abweichung kann die nicht ganz perfekte Oberfläche sein. Die Projektile kommen der Oberfläche in der Nähe von Stufen viel näher, als für eine ebene Fläche. Weil die Elektronendichte größer ist, lösen die Projektile mit erhöhter Wahrscheinlichkeit Elektronen aus.

---

<sup>4</sup>Eine Diskussion des Untergrundes erfolgt in Kap. 5.4, die Elektronenzahlspektren wurden vor Berechnung der Elektronenausbeute korrigiert, Streuereignisse ohne Energieverlust wurden bei der Berechnung der Elektronenausbeute vernachlässigt.



## 5.4 Energieverlust und Elektronenemission für die Streuung von $\text{He}^0$ an $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ / $\text{NiAl}(110)$

In diesem Abschnitt werden Streuexperimente am oxidierten NiAl vorgestellt. Dabei werden Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission für die Streuung von  $\text{He}^0$  vorgestellt. Die Auswirkungen der zweilagigen Oxidschicht auf die Ergebnisse der Experimente sind dabei sehr ausgeprägt.

Wie schon in Kap. 5.1.2 dargestellt wurde, führt die Präparation der Oxidschicht nur zu einer geringfügigen Verschlechterung der Qualität der Oberfläche. Die Winkelverteilungen der gestreuten Projektile werden nur etwas breiter. Dadurch wird in einem bestimmten Raumwinkelbereich (im Experiment die aktive Fläche des Detektors) ein etwas geringerer Anteil der an der  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  -Oberfläche gestreuten Projektile detektiert. Trotz dieser Einschränkung liegt ein großer Vorteil gegenüber den Experimenten am sauberen NiAl darin, dass die  $\text{Al}_2\text{O}_3$  /  $\text{NiAl}$  -Oberfläche weniger empfindlich auf das Restgas in der UHV-Kammer ist. Nach etwa einer Stunde sind trotz des Kammerdrucks von  $p_K \approx 10^{-10}$  mbar bei den Schwellenuntersuchungen zur Elektronenemission für die Streuung von  $\text{He}^0$  an NiAl Veränderungen festzustellen, die auf eine Verunreinigung der Oberfläche hindeuten. Solche Veränderungen der physikalischen Eigenschaften wurden an der  $\text{Al}_2\text{O}_3$  /  $\text{NiAl}$ -Oberfläche erst nach dem Auftauen der Kühlfalle und dem damit verbundenen starken Druckanstieg bis zu  $p_K^{\text{max}} \approx 10^{-7}$  mbar beobachtet. Dies läßt längere Messzeiten an der  $\text{Al}_2\text{O}_3$  /  $\text{NiAl}$ -Oberfläche zu.

In Abb. 5.16 sind die Ergebnisse von sechs verschiedenen Experimenten dargestellt. Dafür wurden 3 keV  $\text{He}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  gestreut. Zunächst wurden die Projektile des Primärstrahls mit dem Channeltron detektiert (Abb. oben links). Dabei werden bei der Detektion der Projektile keine Elektronen im Elektronendetektor nachgewiesen (Abszisse). Die Energie dieser Projektile entspricht beim Auftreffen auf den Detektor 3 keV und dient zur Eichung der Energieverluste der am Target gestreuten Projektile (Ordinate). Die Abbildung in der Mitte links zeigt die Daten zur Streuung der 3 keV  $\text{He}^0$  unter dem sehr flachen Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}}=0,71^\circ$ . In dieser Darstellung sind die Daten zum gestreuten Strahl nicht von jenen des ungestreuten Strahls zu unterscheiden. Bei der Streuung unter einem derart flachen Winkel werden nur sehr wenige Elektronen ausgelöst und der Energieverlust der

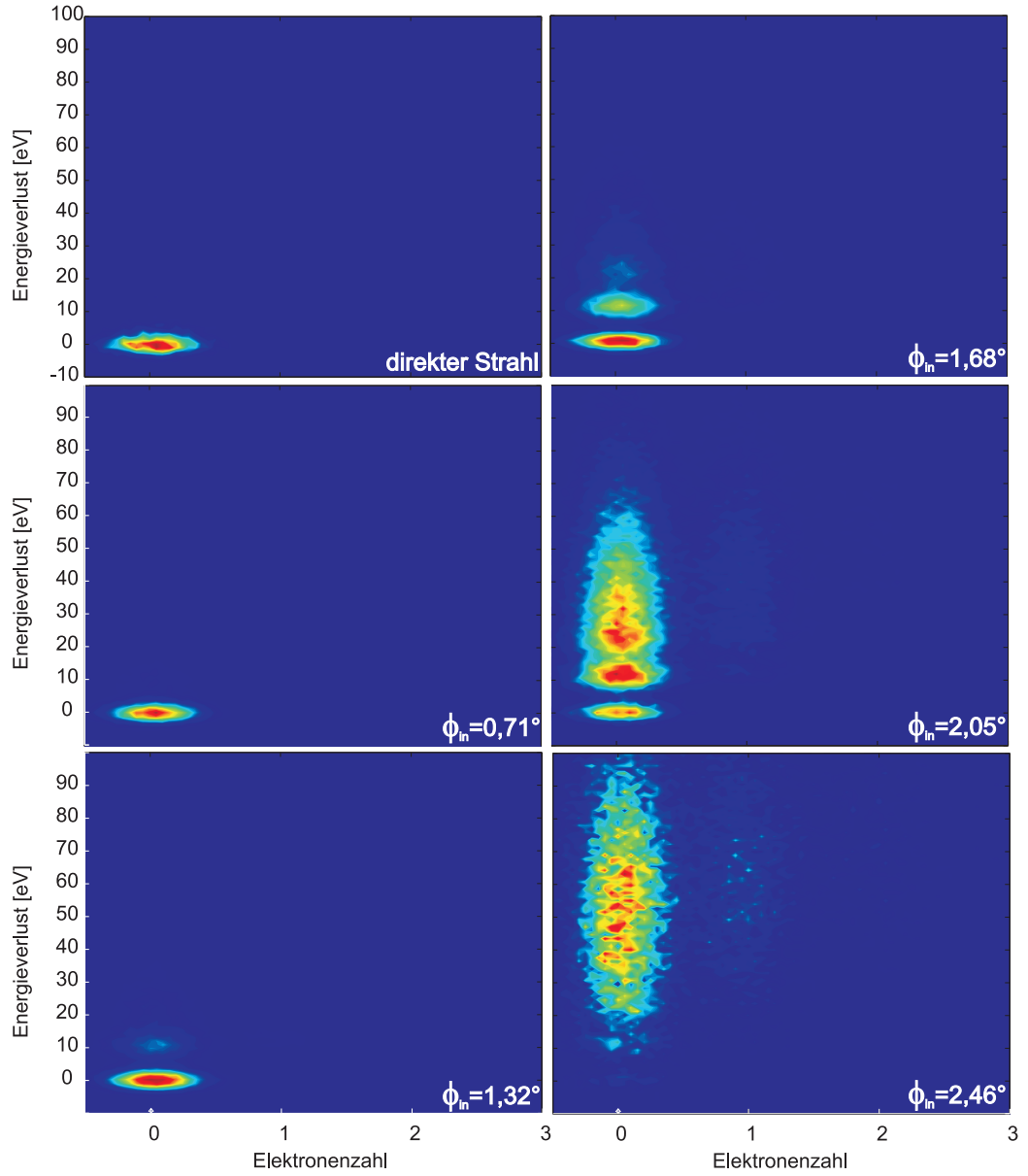


Abb. 5.16: 2-dim Darstellung von Energieverlust und Elektronenausbeute für die Streuung von 3 keV He<sup>0</sup> an Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) / NiAl(110) unter verschiedenen Einfallswinkeln  $\phi_{in} = 0,71^\circ$  bis  $\phi_{in} = 2,46^\circ$  und den ungestreuten (direkten) 3 keV Projekttilstrahls

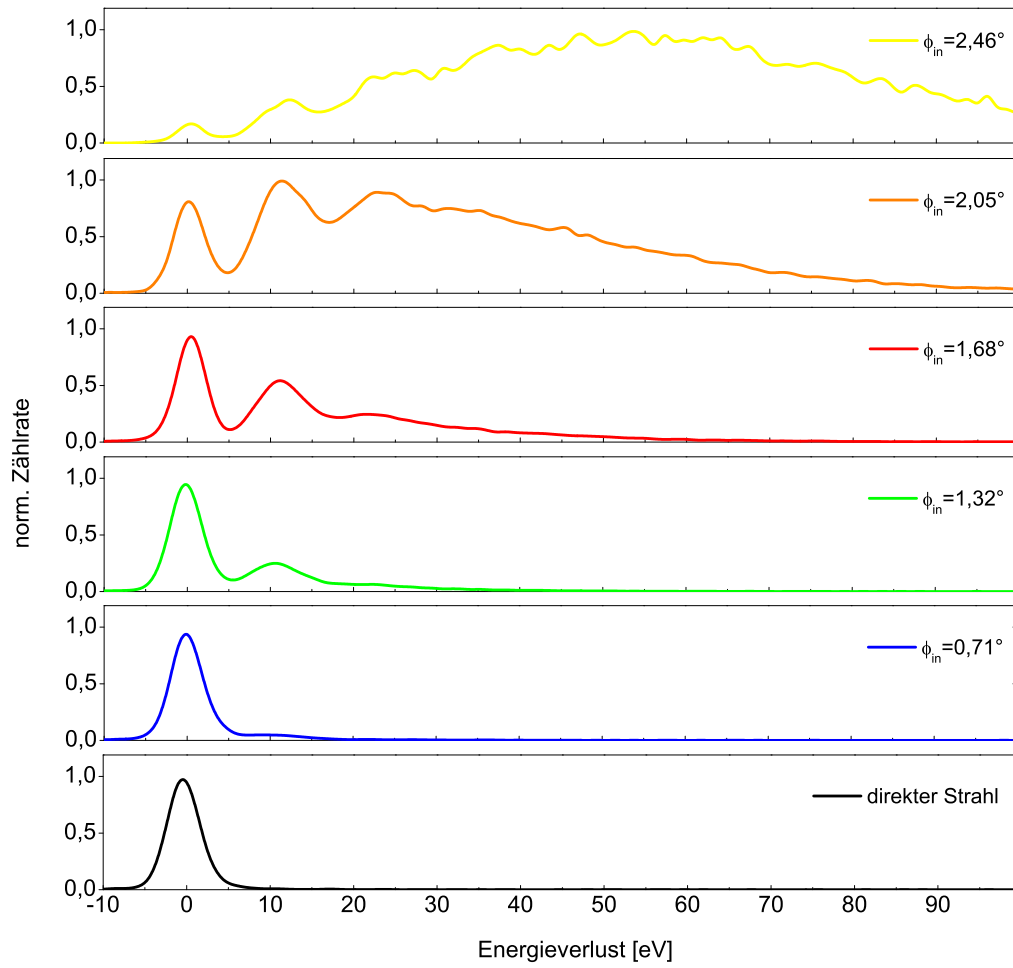


Abb. 5.17: Projektion der Intensitäten der 2-dim. Darstellung (s. Abb. 5.16) auf die Energieverlustachse für die Streuung von 3 keV  $\text{He}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  unter verschiedenen Einfallswinkeln von  $\phi_{\text{in}} = 0,71^\circ$  bis  $\phi_{\text{in}} = 2,46^\circ$  und des ungestreuten 3 keV Projektilstrahls

gestreuten Projektilen ist, im Rahmen der Messgenauigkeit  $\Delta E \approx 0$ . Alle Ereignisse aus der zweidimensionalen Darstellung in Abb. 5.16 wurden für Abb. 5.17 auf die Energieverlustachse projiziert. In dieser Art der Darstellung lassen sich die Daten für den Energieverlust der Projektilen in den verschiedenen Streuexperimenten quantitativ vergleichen. Das Intensitätsmaximum bei 0 eV Energieverlust ist für die Streuung unter allen Einfallswinkeln eindeutig sichtbar. Für Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} > 0,71^\circ$  existiert ein weiteres diskretes Maximum bei ca. 11 eV Energieverlust. Ein drittes Maximum bei ca. 22 eV Energieverlust ist erst ab  $\phi_{\text{in}} = 1,68^\circ$  sichtbar. Außerdem gibt es bei den steileren Einfallswinkeln viele Ereignisse bei denen der Energieverlust nicht mehr einem diskreten Maximum zugeordnet werden kann. In der Graphik für den steilsten Winkel ( $\phi_{\text{in}} = 2,46^\circ$ , Abb. 5.16 unten rechts) sind Ereignisse zu erkennen, bei denen ein Elektron durch die Streuung des  $\text{He}^0$ -Strahls ausgelöst wurde. Unter diesen Bedingungen wird durch ca. jedes zehnte Projektil ein Elektron ausgelöst.

Für Abb. 5.18 wurden die Intensitäten je nach Anzahl der beim Streuprozess emittierten Elektronen separat auf die Energieverlustachse projiziert. Aus diesen Daten kann deshalb der Energieverlust, der für die Emission eines Elektrons aufgebracht wurde, abgelesen werden. Weil sich die Intensitäten stark unterscheiden, wurden die Ereignisse ohne Elektronenemission und Ereignisse mit der Emission eines Elektrons getrennt aufgetragen. Die Streuprozesse ohne Elektronenemission (linke Ordinate, blaue Kurve) fanden ca. zehn mal häufiger statt, als die Streuprozesse mit der Emission eines Elektrons (rechte Ordinate, rote Kurve). Dabei ist klar ersichtlich, dass die rote Kurve gegenüber der blauen Kurve um etwa 13,5 eV verschoben ist. Es kann geschlossen werden, dass die Emission eines Elektrons 13,5 eV „kostet“. Leicht unterschiedlich ist das Verhältnis der einzelnen Maxima untereinander, z.B. ist das erste Maximum der Prozesse ohne Elektronenemission wesentlich stärker als das zweite Maximum. Bei den Streueignissen mit der Emission eines Elektrons ist die Differenz nicht so groß.

In Abb. 5.18 sind bei 0 eV Energieverlust Streueignisse zu erkennen, die mit der Emission eines Elektrons verbunden sind. Aus Gründen der Energieerhaltung sind diese Ereignisse jedoch nicht möglich. Tatsächlich resultieren diese Ereignisse aus Prozessen, bei denen mindestens zwei Projektilen in einem Teilchenpaket vorhanden sind. Diese Projektilen wurden deshalb auch innerhalb des Zeitfensters des Time-of-Flight-Experiments an der Oberfläche gestreut. Die Trajektorie eines der Projektilen verlief so, dass das Projektil durch das Channelplate detektiert wurde. Während der Streuung dieses Elektrons wurde kein Elektron von der Oberfläche emittiert, das Projektil hat folglich auch keine Energie abgegeben. Bei der Streuung mindestens eines weiteren Projektils aus dem selben Teilchenpaket wird jedoch ein Elektron

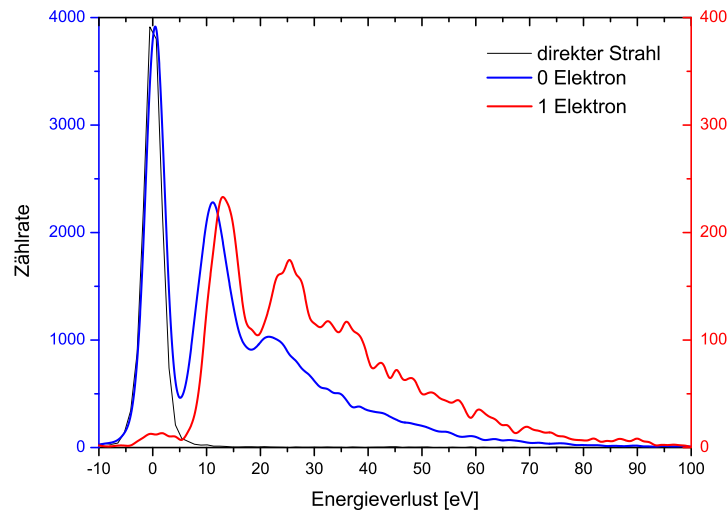


Abb. 5.18: Energieverlustspektren, für Projektile, die kein (blau) bzw. ein (rot) Elektron ausgelöst haben, 3 keV  $\text{He}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 1,68^\circ$

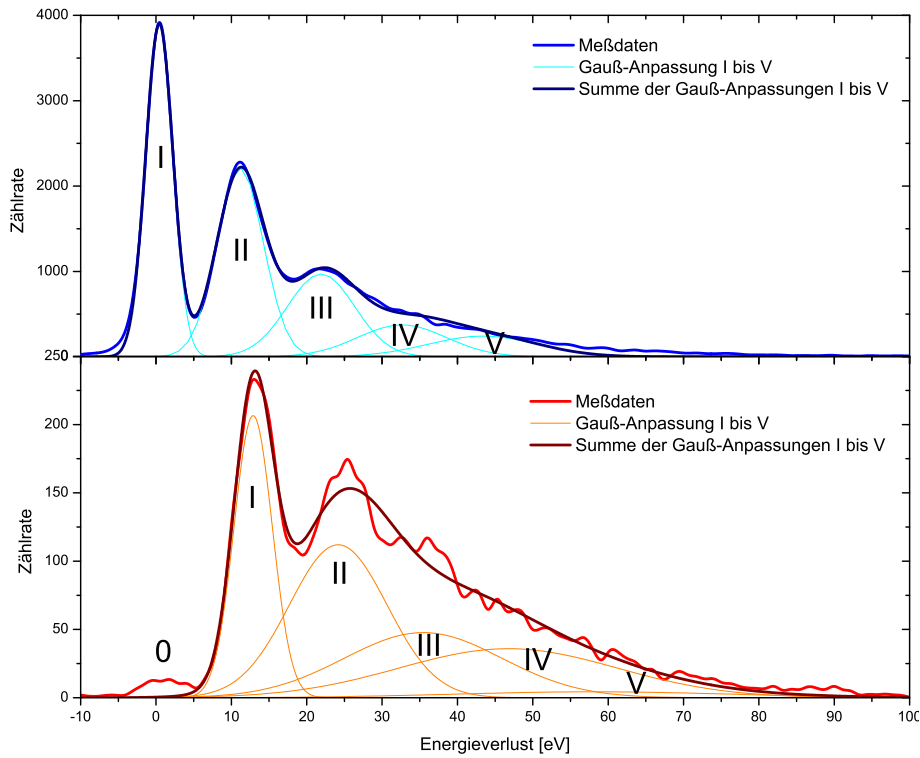


Abb. 5.19: Energieverlustspektren, für Projektile, die kein (blau) bzw. ein (rot) Elektron ausgelöst haben, 3 keV  $\text{He}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 1,68^\circ$

emittiert und im Elektronendetektor detektiert. Dieses Elektron wird in der Koinzidenzschaltung dem Projektil ohne Energieverlust detektiert wurde zugeordnet. Die Trajektorie des Projektils, das für die Emission des Elektrons ursächlich war, kann nun so verlaufen sein, dass das Projektil den Detektor trifft. Dann wird trotzdem nur das erste Projektil registriert. Weil die Wahrscheinlichkeit für die Emission eines Elektrons durch ein Projektil sehr gering ist, sollte dieser Effekt nur selten auftreten. Es müssen gleichzeitig zwei Projektile in einem Paket vorhanden sein und eines muss ein Elektron auslösen.

Die Intensität des Peaks in Abb. 5.18 ist aber größer, als sich mit diesen Annahmen abschätzen läßt. Das kann damit erklärt werden, dass das Elektron auslösende Projektil z.B. an einer Stufenkante der Kristalloberfläche gestreut wird. Die Wahrscheinlichkeit, ein Elektron durch einen binären Stoß auszulösen, ist für einen solchen Prozess größer. Ein derart gestreutes Projektil wird mit großer Wahrscheinlichkeit nicht im Channelplate detektiert werden, für die Registrierung eines koinzidenten Ereignisses sorgt wie oben beschrieben das Projektil welches kein Elektron ausgelöst hat. Wenn sich nur ein Projektil in einem Paket befindet, beeinflussen die durch Streuung eines Projektils an einer Stufenkante emittierten Elektronen die Bestimmung der Elektronenausbeute nicht, weil die ursächlichen Projektile nur in äußerst seltenen Fällen den Detektor erreichen und eine Koinzidenzmessung auslösen.

Für die Auswertung der einzelnen Maxima in den Energieverlustspektren wurden die Spektren korrigiert. Die Ereignisse mit Elektronenanregung aber ohne Energieverlust wurden vor der weiteren Auswertung aus den Energieverlustspektren entfernt.

Die Ergebnisse der Auswertung der einzelnen Maxima in Abb. 5.18 durch eine Anpassung des jeweiligen Maximums an eine Gauß-Kurve ist in Abb. 5.19 dargestellt. Außerdem wurde jeweils die Summe der Gauß-Kurven gebildet und zusätzlich dargestellt. Diese Summenkurve deckt sich sehr gut mit den experimentellen Daten. Die einzelnen Maxima wurden jeweils an folgende Funktion angepaßt:

$$G = \frac{A}{w \sqrt{\frac{\pi}{2}}} e^{\left(-2 \frac{(\Delta E - \Delta E_c)^2}{w^2}\right)} \quad (5.10)$$

Aus diesen Anpassungen ergeben sich folgende Parameter für die Streueignisse ohne Elektronenemission (Abb. 5.19 oben):

	I	II	III	IV	V
$\Delta E_c/\text{eV}$	$0,4 \pm 0,5$	$11,2 \pm 0,7$	$21,9 \pm 1,5$	$32,6 \pm 2,2$	$43,4 \pm 2,9$
$w/\text{eV}$	$3,4 \pm 0,1$	$6,2 \pm 0,3$	$8,9 \pm 0,5$	$11,7 \pm 0,9$	$14,5 \pm 1,2$
A	17689	17079	10888	5512	4422

und für die Streuereignisse mit Elektronenemission (Abb. 5.19 unten):

	I	II	III	IV	V
$\Delta E_c/\text{eV}$	$12,9 \pm 0,4$	$24,2 \pm 0,7$	$35,5 \pm 1,8$	$46,7 \pm 2,5$	$58,0 \pm 3,5$
$w/\text{eV}$	$4,9 \pm 0,3$	$12,6 \pm 0,4$	$20,2 \pm 0,8$	$27,9 \pm 1,2$	$35,5 \pm 2,5$
A	1315	1820	1251	1102	546

Die Differenz der Energieverluste beträgt demnach für die Streuereignisse ohne Elektronenemission jeweils  $\Delta E_c^{\text{diff}} = 10,7 \pm 0,5$  eV und für die Streuereignisse mit Elektronenemission jeweils  $\Delta E_c^{\text{diff}} = 11,3 \pm 0,7$  eV. Diese Energiedifferenzen werden der Anregung eines Exzitons zugeschrieben. Andersson et al. und Schmid et al. finden in ihren Arbeiten eine Bandlücke von ca. 7-8 eV [3, 99] für den Alumina-Film.

Aus der Differenz der jeweils ersten Maxima ergibt sich die für die Emission eines Elektrons aufgebrauchte Energie, sie beträgt  $\Delta E_c^{\text{diff}} = 12,5 \pm 0,5$  eV.

Die Breite  $w$  der Gauß-Kurven wird bei den Streuereignissen ohne Elektronenemission für jedes exzitronische Maximum um ca. 2,8 eV breiter, bei den Streuereignissen mit Elektronenemission wächst die Breite für jedes exzitronische Maximum um ca. 7,5 eV. Diese stark zunehmende Breite der einzelnen Maxima ist der Grund dafür, dass die einzelnen Peaks bei Experimenten mit höheren Projektilenergien nicht mehr voneinander getrennt werden können. Die resultierende Kurve für den Energieverlust der Projektile gleicht dann insgesamt einer Gauß-Verteilung und der Situation bei der Streuung an metallischen Oberflächen.

In Abb. 5.20 sind die experimentell ermittelten Energieverluste für 3 keV -  $\text{He}^0$  -Projektile bei der Streuung an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  unter verschiedenen Einfallswinkeln  $\phi_{\text{in}}$  dargestellt. Generell zeigt sich ein geringer Anstieg des Energieverlusts bei steigender Senkrechterenergie. Die Projektile des ersten Maximums der Streuereignisse ohne Elektronenemission haben bei Einfall unter  $\phi_{\text{in}}=2,46^\circ$  nur  $\Delta E=0,7$  eV Energie abgegeben. Für Einfallswinkel unter  $\phi_{\text{in}}=1,5^\circ$  ist für diese Streuprozesse gar kein Energieverlust nachweisbar.

In Abb. 5.21 sind die Differenzen der Energieverluste für die Streuung von 3 keV  $\text{He}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{\text{in}}$  dargestellt. Die schwarzen Symbole repräsentieren die zur Emission eines

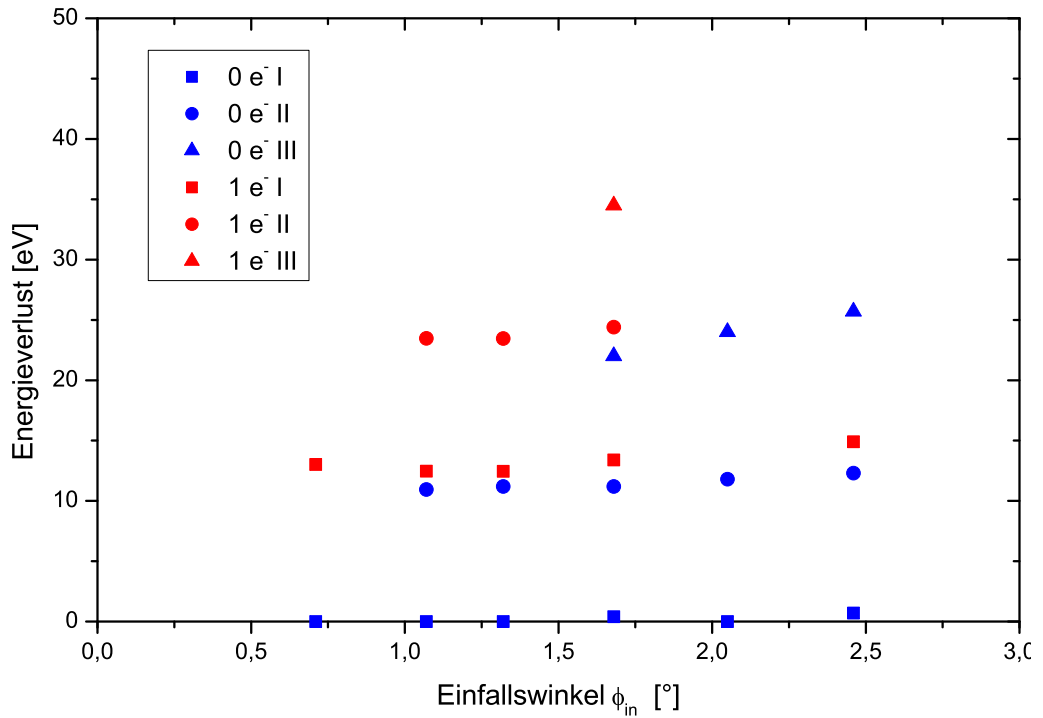


Abb. 5.20: Energieverluste der verschiedenen Peaks für die Streuung von 3 keV  $\text{He}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{in}$ , die Bezeichnung der Maxima wurde aus Abb. 5.19 übernommen, die blauen Symbole stehen für Streuereignisse ohne Elektronenemission, die roten für Ereignisse mit Elektronenemission

Elektrons nötige Energie. Es zeigt sich, dass diese Energiedifferenz nicht davon abhängt, ob das erste, zweite oder dritte Elektron ausgelöst wird. Die jeweils zusätzliche Energie ist konstant und wird dem gesamten Energieverlust hinzu addiert. Der generelle Verlauf des durch die Elektronenemission verursachten Anteils des Gesamtenergieverlustes hat bei etwa  $\phi_{in} = 1,3^\circ$  für diese Projektilenergie (3 keV) ein Minimum. Für kleinere und für größere Einfallswinkel steigt der Energieverlust der Projektile an. Bei den steileren Einfallswinkeln kommen die Projektile näher an die Atomrümpfe heran. Im Bereich einer höheren Elektronendichte wird während des Streuprozesses mehr Energie durch binäre Stöße abgegeben. Für sehr flache Einfallswinkel  $\phi_{in}$  ist die Trajektorie der Projektile vor der Oberfläche länger und die Projektile kommen nicht so nah an die Oberfläche heran, sie werden stärker gebremst.

Die Energie zur Anregung von Exzitonen ist in Abb. 5.21 durch rote (keine Elektronenemission) und blaue (gleichzeitige Emission eines Elektrons) Symbole dargestellt. Die Messwerte streuen deutlich mehr als beim elek-



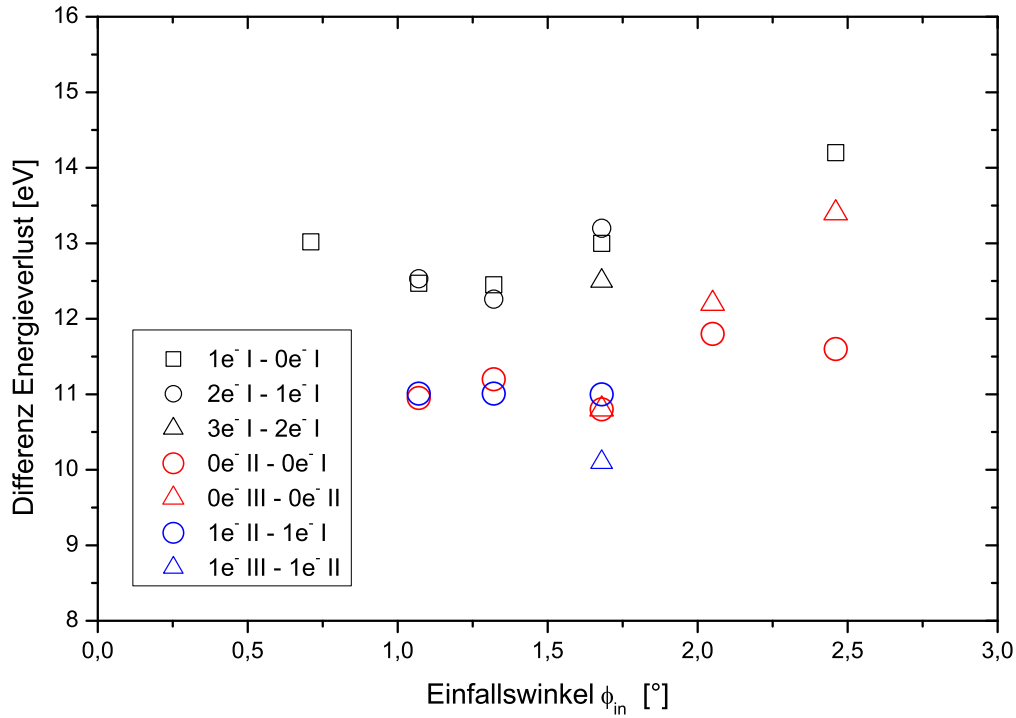


Abb. 5.21: Differenzen der Energieverluste für die Streuung von 3 keV  $\text{He}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{in}$

tronischen Energieverlust. Verantwortlich dafür sind vorrangig die größeren Breiten der einzelnen Maxima bei der Streuung unter größeren Einfallswinkeln. Trotzdem läßt sich der Darstellung in Abb. 5.21 entnehmen, dass die Energieverluste durch die Anregung von Exzitonen, für alle Einfallswinkel ca. 2 eV kleiner sind, als zur Emission eines Elektrons. Ein signifikanter Unterschied des Energieverlusts zwischen der Anregung des ersten und zweiten Exzitons kann nicht festgestellt werden. Außerdem unterscheiden sich die Energien zur Anregung eines Exzitons mit und ohne gleichzeitiger Elektronenemission nicht.

In Abb. 5.22 ist der Energieverlust der gestreuten  $\text{He}^0$ -Projektilen bei der Streuung an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  (rote Symbole) als Funktion der Projektilgeschwindigkeit dargestellt. Die Senkrechtenergie beträgt konstant  $E_{\perp} = 3$  eV. Als Vergleich sind die entsprechenden Energieverluste bei der Streuung an  $\text{NiAl}(110)$  (blaue Symbole) dargestellt. Die Projektilen, die an der  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$ -Oberfläche gestreut werden, verlieren bis zur Projektilgeschwindigkeit von ca. 0,2 a.u., das entspricht  $E=4$  keV, nur wenig Energie. Die Werte streuen um ca. 1 eV. Im Gegensatz dazu verlieren die Projektilen vor der  $\text{NiAl}(110)$ -Oberfläche z.B. bei  $v = 0,2$  a.u. etwa 83,5

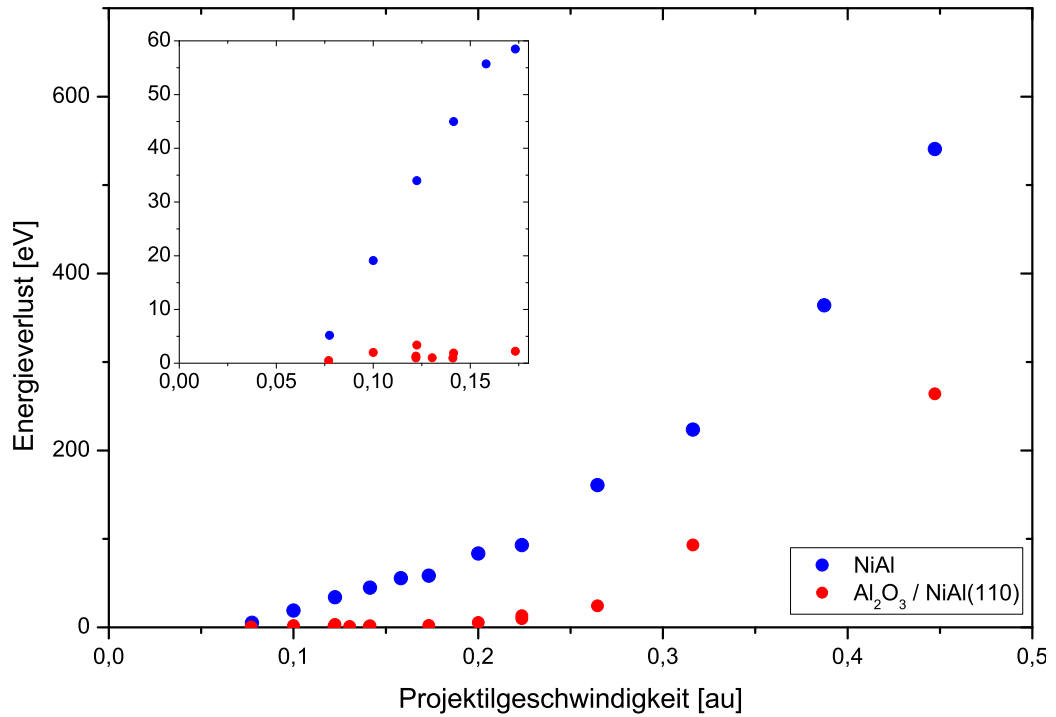


Abb. 5.22: Energieverlust der gestreuten  $\text{He}^0$ -Projektilen bei der Streuung an NiAl(110) (blau) und an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) (rot) bei konstanter Senkrechtenergie  $E_{\perp}=3\text{eV}$

eV an kinetischer Energie. Der Energieverlust für langsame am metallischen Target gestreute Projektilen steigt linear mit der Projektilgeschwindigkeit an. Projektilen, die am Oxidfilm gestreut werden, verlieren erst ab Projektilgeschwindigkeiten  $v > 0,25$  a.u. nennenswert an kinetischer Energie.

In Abb. 5.23 sind die Elektronenausbeuten für die Streuung von  $\text{He}^0$ -Projektilen an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) (rote Symbole) und an NiAl(110) (blaue Symbole) als Funktion der Projektilgeschwindigkeit dargestellt. Für Projektilgeschwindigkeiten  $v < 0,2$  a.u. werden bei der Streuung von He an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) größere Elektronenausbeuten gemessen, als bei der Streuung an NiAl(110). Das ist besonders deutlich im Insert von Abb. 5.23 zu erkennen. Für Projektilgeschwindigkeiten  $v > 0,3$  a.u. werden etwa gleich große Elektronenausbeuten gemessen.

Im Vergleich zur Streuung an KI(001) und LiF(001) werden bei der Streuung von  $\text{He}^0$  an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) deutlich geringere Elektronenausbeuten gemessen. Die Elektronenausbeute beträgt für die Streuung von  $\text{He}^0$  mit der Projektilgeschwindigkeit  $v = 0,3$  a.u. für die Streuung an KI(001)

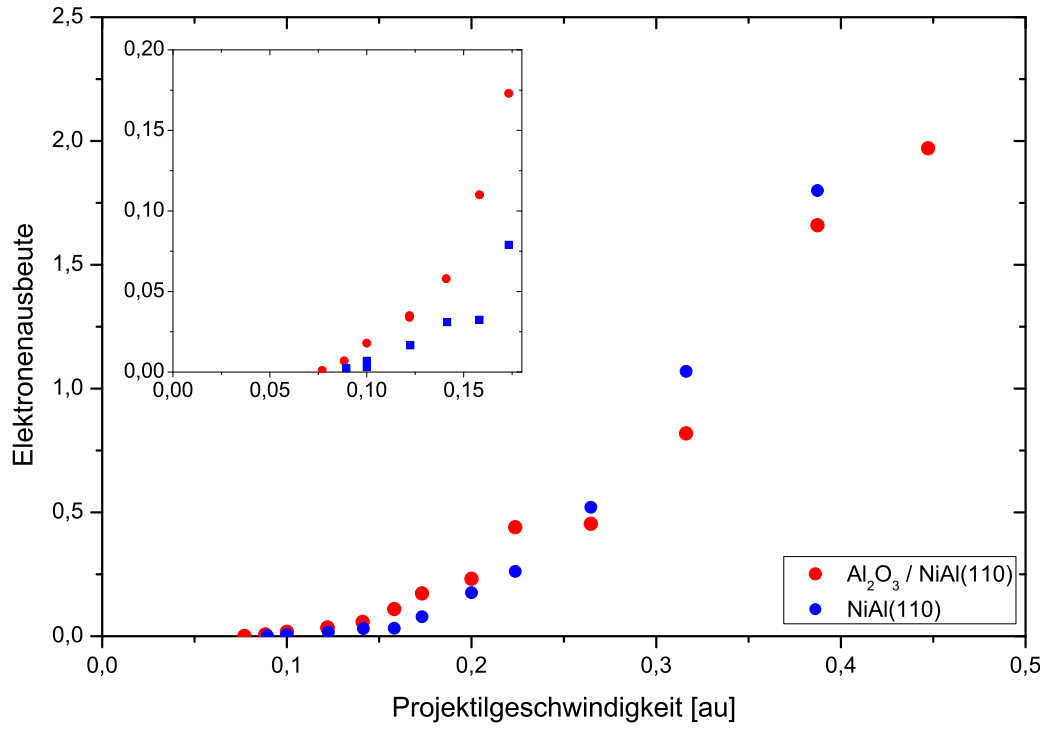


Abb. 5.23: Elektronenausbeute bei der Streuung von  $\text{He}^0$ -Projektilen an NiAl(110) (blau) und an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) (rot)

und LiF(001) ca.  $\gamma = 7$  [62]. Im Vergleich dazu wird durch gleich schnelle  $\text{He}^0$ -Atome bei der Streuung an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) nur etwa ein Elektron emittiert ( $\gamma = 0,87$ ).

## 5.5 Abhängigkeit von Energieverlust und Elektronenemission von der Sauerstoffbedeckung der Oberfläche

Die Präparation des geordneten Oxidfilms auf der NiAl(110) -Oberfläche ist, wie in Kap. 5.1.2 beschrieben, relativ einfach und auch mit wenig experimenteller Erfahrung reproduzierbar. Eine zu hoch gewählte Sauerstoff-Dosis während des Oxidierens der NiAl(110) -Oberfläche führt nicht zu einem dickeren Oxidfilm. Der auf der NiAl(110) -Oberfläche präparierte Oxidfilm ist immer zweilagig. Der Nachteil einer zu hoch gewählten Sauerstoff-Dosis ist ausschließlich eine dauerhafte Verschlechterung des Kammerdrucks. Bei zu niedrig gewählter Sauerstoff-Dosis können im Gegensatz dazu Auswirkungen auf die Eigenschaften des Oxidfilms festgestellt werden.

In diesem Abschnitt werden Experimente die an nicht vollständig oxidierten Oberflächen vorgestellt. Dabei wurde insbesondere die Elektronenemission und der Energieverlust von  $\text{He}^0$  - Projektilen untersucht und mit den Ergebnissen aus den Experimenten an der NiAl(110) - und der  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) -Oberfläche verglichen. Die Filme wurden mittels AES und LEED charakterisiert.

In Abb. 5.24 ist eine Häufigkeitsverteilung für Streuereignisse (3 keV  $\text{He}^0$ , Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 1,73^\circ$ ) als Funktion von Energieverlust und Elektronenausbeute an einer nicht vollständig oxidierten NiAl(110) -Oberfläche gezeigt (250 L statt 1200 L). Augenscheinlich ist, dass es viele Streuereignisse ohne Energieverlust (0 eV) der Projektilen und ohne die Emission eines Elektrons gibt. Außerdem zeigen sich die auf die Anregung von Exzitonen zurückzuführenden zusätzlichen Maxima. Außer diesen schmalen Maxima von 10 eV Breite, existiert bei ca. 70 eV Energieverlust ein breites Maximum. Die Intensität der Ereignisse mit der Emission eines Elektrons ist gering. Dies zeigt sich deutlicher noch in den in Abb. 5.25 dargestellten Intensitätsverteilungen. Es ist die Intensität der unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 1,73^\circ$  gestreuten 3 keV  $\text{He}^0$  -Projektilen, die kein (blaue Kurve) bzw. ein (rote Kurve) Elektron ausgelöst haben, in Abhängigkeit vom Energieverlust aufgetragen. Die Kurven gleichen bis ca. 40 eV den Energieverlusten an der vollständig oxidierten Oberfläche. Das breite Maxima bei ca. 70 eV für die Projektilen ohne Elektronenemission und das um ca. 10 eV verschobene Maxima für die Projektilen mit Elektronenemission vergleicht sich mit der  $\text{He}^0$  -Streuung am sauberen NiAl(110).

Durch einen einfachen Vergleich der Ereignisse unter- und oberhalb 40 eV

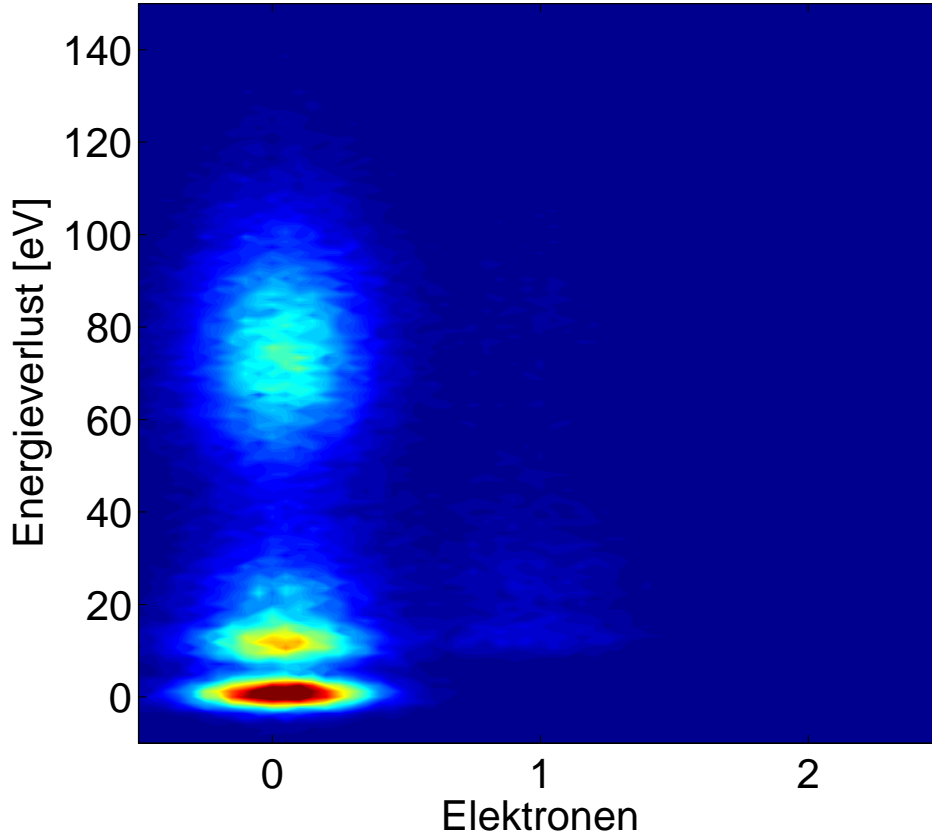


Abb. 5.24: Häufigkeitsverteilung für Streuereignisse als Funktion von Energieverlust und Elektronenausbeute, für 3 keV  $\text{He}^0$  an nicht vollständig (250 L) mit dem Oxidfilm bedecktem NiAl(110) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 1,73^\circ$

Energieverlust kann abgeschätzt werden, dass etwa gleich viele Streuereignisse am Oxid wie Streuereignisse und am Metall stattgefunden haben. Eine genauere Analyse folgt durch Anpassung der einzelnen Maxima an Gaußkurven. Außerdem werden die Intensitäten der Streuereignisse mit Elektronenemission einbezogen. Zunächst soll hier nur die Beobachtung festgehalten werden, dass auf eine etwas kleinere Elektronenausbeute für die 'metallisch' gestreuten Projektile geschlossen werden kann.

In Abb. 5.26 sind für verschiedene Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}}$  die Energieverluste bei der Streuung an der mit 250 L oxidierten Oberfläche gestreuten 3 keV  $\text{He}^0$ -Projektile mit den Energieverlusten der am sauberen NiAl(110) bzw. dem vollständig oxidierten  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) gestreuten Projektile verglichen. Die Energieverluste der Projektile, die weder ein Elektron aus-

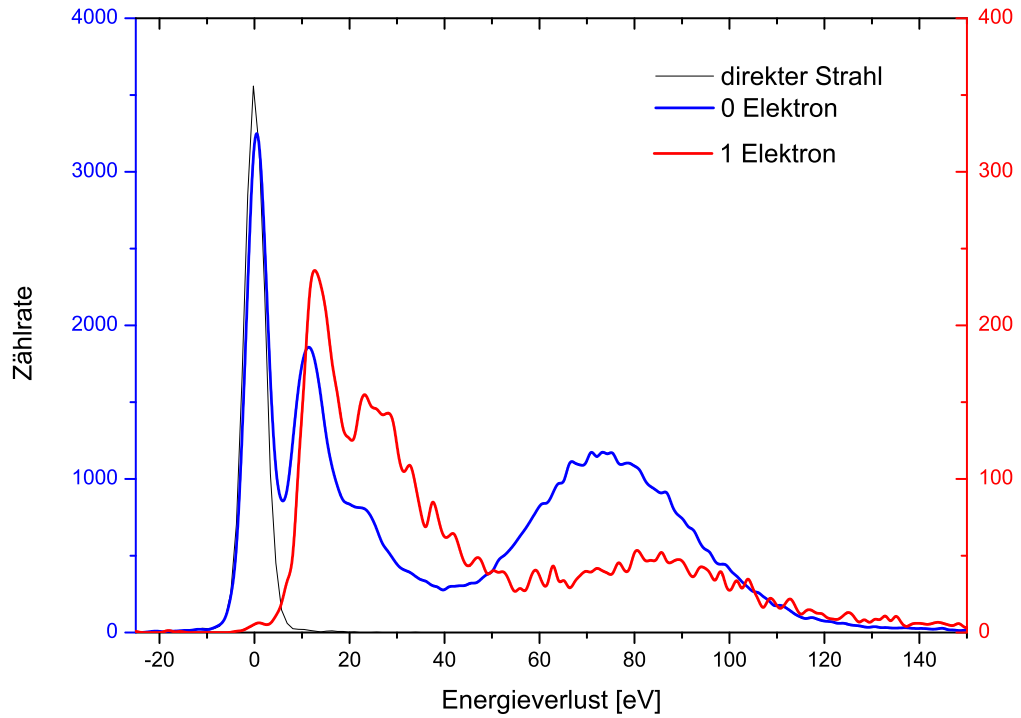


Abb. 5.25: Energieverlustspektren für Projektile, die kein (blau) bzw. ein (rot) Elektron ausgelöst haben, 3 keV  $\text{He}^0$  an nicht vollständig (250 L) mit dem Oxidfilm bedecktem NiAl(110) unter dem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} = 1,73^\circ$

gelöst noch ein Exziton angeregt haben, sind sowohl für die Streuung am  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) (offene Sterne) als auch für die Streuung am nur mit 250 L oxidierten NiAl(110) (geschlossene Sterne) für alle Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}}$  sehr klein. Auch die hier nicht dargestellten Peakbreiten stimmen insofern überein, als dass sie in beiden Fällen durch die Breite des direkten, ungestreuten Strahls bestimmt werden. Auch für die Projektile, die zwar während des Streuprozesses zu keiner Elektronenemission geführt haben, aber für die Anregung eines Exzitons verantwortlich sind, stimmen die Energieverluste sehr genau überein (offene bzw. geschlossene Kreise). Die Projektile, die dem 'metallischen' Maximum zuzuordnen sind, haben bei der Streuung an der mit 250 L oxidierten Oberfläche für Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}} < 2^\circ$  etwas größere Energieverluste erfahren, als bei der Streuung am sauberen NiAl.

Genauere Vergleiche der einzelnen Beiträge zum Energieverlust sind in Abb. 5.27 a)-c) dargestellt. Analog zu Abb. 5.21 und der Erläuterung dort wurden Differenzen der Energieverluste in Abhängigkeit vom Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}}$  bei konstanter Projektilgeschwindigkeit aufgetragen. In a) sind die Energieverlustdifferenzen, die zur Emission eines Elektrons aufgebracht werden,

der 'metallischen' Maxima (blau) mit den Energieverlustdifferenzen für die Streuung am sauberen NiAl(110) (schwarz) verglichen. Es zeigen sich vergleichbare Daten

In Abb. 5.27 c) sind die Energieverlustdifferenzen die zur Anregung von Exzitonen bei der Streuung an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  /  $\text{NiAl}(110)$  und an der mit 250 L oxidierten  $\text{NiAl}(110)$  -Oberfläche verglichen. Für diese Streuprozesse wird jeweils ein Energieverlust von ca. 11 eV gemessen.

In Abb. 5.28 ist die Elektronenausbeute bei Streuung von 3 keV  $\text{He}^0$  an der mit 250 L oxidierten NiAl(110)-Oberfläche mit der Elektronenausbeute an NiAl(110) bzw.  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) verglichen. Es zeigt sich wiederum eine gute Übereinstimmung der Werte für den Energieverlust der Streueignisse der „oxidischen“ Maxima mit den Energieverlusten der an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$

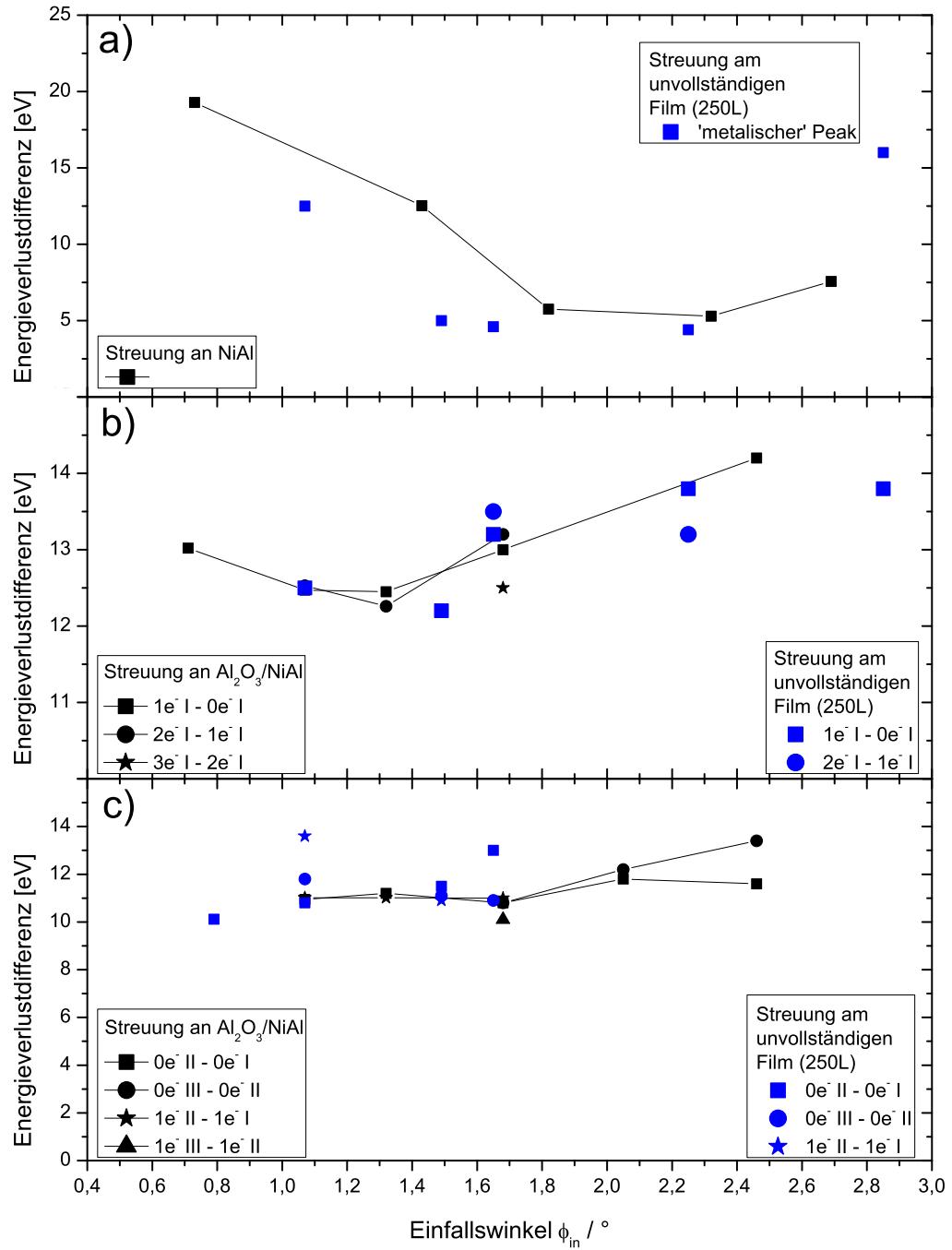


Abb. 5.27: Energieverlustdifferenzen bei der Streuung von 3 keV  $He^0$  an der mit 250 L oxidierten NiAl(110)-Oberfläche, Vergleich mit der Streuung an NiAl (a) und  $Al_2O_3 / NiAl$  (b,c)



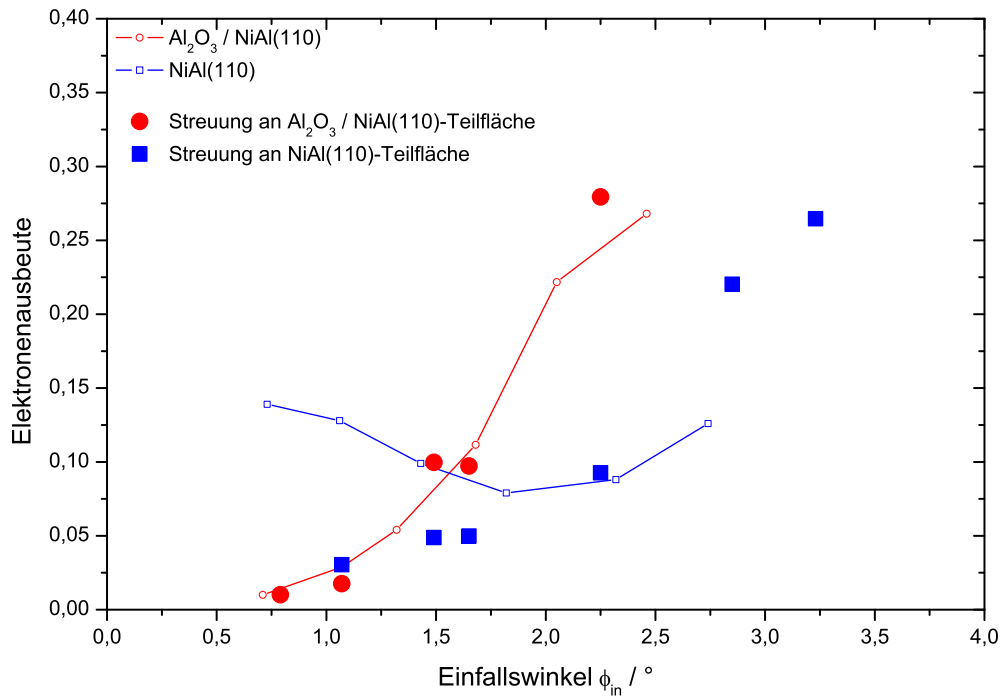


Abb. 5.28: Elektronenausbeute bei der Streuung von 3 keV  $\text{He}^0$  an der mit 250 L oxidierten NiAl(110) -Oberfläche, Vergleich mit der Streuung an NiAl und  $\text{Al}_2\text{O}_3 / \text{NiAl}$

/ NiAl(110) gestreuten Projektile.

Für Einfallswinkel  $\phi_{in} < 1,5^\circ$  werden an der mit 250 L oxidierten NiAl(110)-Oberfläche viel kleinere Elektronenausbeute gemessen (ca. 1% der Projektile lösen ein Elektron aus) als bei der Streuung an sauberen NiAl (bis zu 10% der Projektile lösen ein Elektron aus). Die Argumentation, nach der die Elektronenausbeute bei der Streuung an Metallen für kleinere Einfallswinkel  $\phi_{in}$  ansteigt, weil die Trajektorien der Projektile so flach werden, dass binäre Stöße der Projektile mit Adatomen oder an Stufenkanten bedeutsamer werden und zur Elektronenemission beitragen, scheint für die Streuung an der mit 250 L oxidierten NiAl(110)-Oberfläche nicht richtig zu sein. Eine Schlußfolgerung wäre, dass die Projektile nur an den mit Sauerstoff bedeckten oder an sehr sauberen NiAl-Teilflächen streuen. Gestützt wird diese These durch den Umstand, dass das Wachstum der Oxidschicht auf NiAl(110) an Fehlstellen des NiAl(110), also z.B. Punktdefekten und Stufenkanten, beginnt.

Die Experimente an der nur teilweise oxidierten NiAl(110)-Oberfläche haben erstmals gezeigt, dass es mit der Methode der streifenden Streuung möglich ist, an Teilflächen einer Oberfläche zu streuen. Die Ergebnisse der Ex-

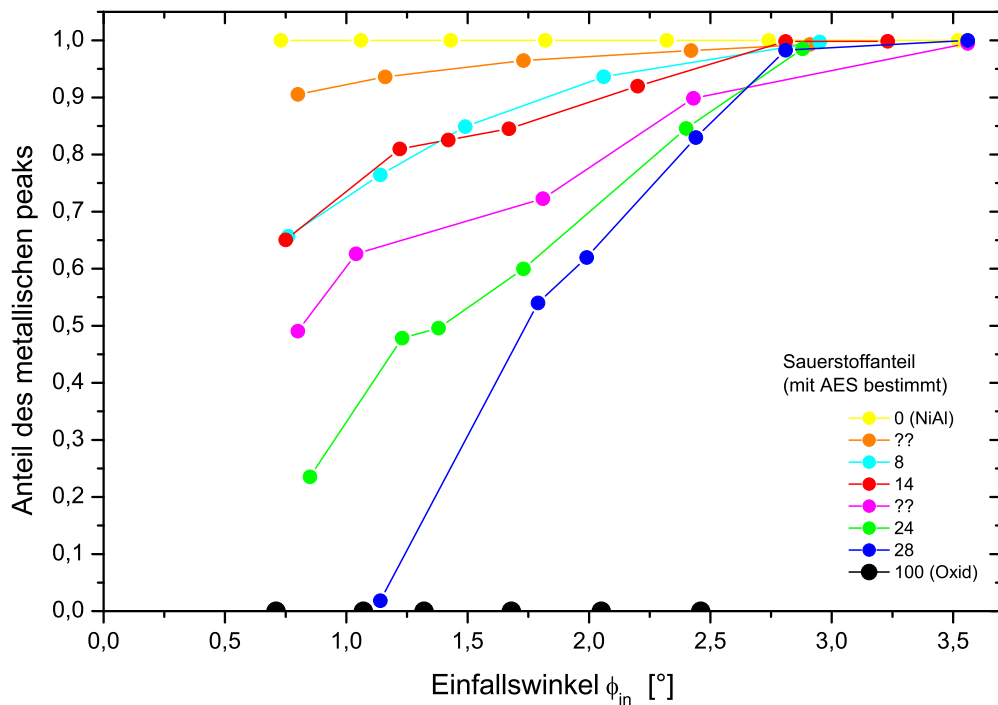


Abb. 5.29: Bestimmung des Verhältnisses der sauberen NiAl zur oxidierten Oberfläche des NiAl(110) -Kristalls, Bestimmung des O-Anteils in der Oberfläche mittels AES, aufgetragen sind für verschiedene O-Anteile in der Oberfläche die Anteile der Streuung an metallischen Bereichen auf der Oberfläche

perimente zeigen, dass die Projektile entweder an der metallischen NiAl(110)-Oberfläche oder an der  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110)-Oberfläche gestreut werden. Die laterale Ausdehnung der oxidierten und der nicht oxidierten Flächen muss also jeweils im Bereich von  $100 \text{ \AA}$  liegen, sonst würden sich die jeweiligen Daten überlagern. Außerdem konnte gezeigt werden, dass die Oxidschicht auf der NiAl(110)-Oberfläche auch dann in Richtung senkrecht zur Oberfläche komplett ausgebildet ist, wenn die angebotene Dosis an Sauerstoff-Atomen nicht zur Ausbildung eines geschlossenen Oxidfilms ausreicht.

Unter Ausnutzung der Erkenntnis, dass die gestreuten Projektile entweder viel oder wenig Energie verloren haben und deshalb entweder an einer oxidierten Teilfläche oder an einer sauberen NiAl-Teilfläche gestreut wurden, werden im folgenden Experimente vorgestellt, bei denen die Dosis des angebotenen Sauerstoffs variiert wurde. In den Untersuchungen sollte eine klare Abhängigkeit zwischen der angebotenen Sauerstoff-Dosis und dem Anteil der an der 'metallischen' bzw. der oxidierten Teilfläche gestreuten Projektile gefunden werden. In Abb. 5.29 sind Streuexperimente an mit einer unter-

schiedlichen Sauerstoff-Dosis oxidierten NiAl(110)-Oberflächen dargestellt. Aufgetragen ist der Anteil der Streuprozesse mit einem der Streuung am Metall entsprechendem Energieverlust als Funktion des Einfallswinkels  $\phi_{\text{in}}$ . Die gelben Symbole repräsentieren Streuexperimente am sauberen NiAl und die schwarzen Symbole geben Experimente an der vollständigen Oxidschicht wieder.

Die wesentliche Eigenschaft aller Kurven ist das Ansteigen des Anteils der Streuung an metallischen Teilflächen mit größer werdendem Einfallswinkel  $\phi_{\text{in}}$ . Eine reine Wechselwirkung eines Projektils mit ausschließlich oxidischen Teilflächen ist für flache Einfallswinkel wesentlich wahrscheinlicher, als bei der Streuung unter steilerem Einfallswinkel.

Es war nicht möglich die Anteile der Streuung an den verschiedenen Teilflächen mit der Sauerstoff-Dosis während des Wachstums der Schicht in einen sinnvollen Zusammenhang zu bringen. Die Bedingungen in der UHV-Kammer während der Präparation lassen sich nicht genau genug vorgeben. So ist z.B. der Druck von  $1 \cdot 10^{-7}$  mbar für 13s einzustellen um 1 Langmuir zu erhalten. Abgesehen von der Ungenauigkeit der Druckmessung entsteht auch durch das Auf- und Zudrehen des Nadelventils ein relativ großer Fehler. Für das Auf- und Zudrehen des Nadelventils wird jeweils ca. 10 s benötigt. Eine andere Fehlerquelle ist die Temperatur des Targets, das Erreichen der Raumtemperatur nach der Präparation der sauberen NiAl(110)-Oberfläche vor der Oxidation kann nur abgeschätzt werden.

In Abb. 5.29 sind deshalb die durch verschiedene Farben markierten unterschiedlichen Bedeckungen durch eine Analyse der Augermaxima für Sauerstoff ( $\text{O}_{\text{KLL}}$ ) und Aluminium ( $\text{Al}_{\text{KLL}}$ ) bestimmt worden. Dafür wurden die nach der jeweiligen Sensitivität ([26]) gewichteten Peak-to-Peak-Intensitäten miteinander ins Verhältnis gesetzt. Die Abfolge der Kurven für den Anteil der an einer sauberen NiAl(110)-Teilfläche gestreuten Projektile entspricht den aus den Augerspektren ermittelten Oxid/Metalloberfläche-Verhältnis.

Der Darstellung kann man entnehmen, dass es nicht möglich war Oberflächen mit höherem Sauerstoffanteil als 28 (mit AES bestimmt, vgl. Abb. 5.29) zu erzeugen. Alle Versuche mit mehr als 250 L führten (nach dem Ausheilen der Schicht) zu den gleichen Ergebnissen, wie die normale, in Kap. 5.1.2 vorgestellte Präparation der  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110)-Oberfläche bei 1200 L. Für geringe Sauerstoff-Dosen ( $< 20$  L) werden die experimentellen Schwierigkeiten so groß, dass vor Beginn des Experiments festgelegte Sauerstoffanteile nicht erzielt werden. Zusätzlich werden die Fehler bei der Auswertung der Peak-to-Peak-Intensitäten sehr groß.

Die Präparation von Oxid-Teilflächen auf der NiAl(110)-Oberfläche ist möglich, die streifende Ionenstreuung kann dazu benutzt werden die Anteile der verschiedenen Flächen zu bestimmen. Um zu Überprüfen wie genau die

die Anteile von einander getrennt werden könnten, fehlten bei den Experimenten zu dieser Arbeit die entsprechenden Aussagen zu den Flächenverhältnissen. Entsprechende STM-Untersuchungen an einem gestuften NiAl(110)-Kristall werden von Ulrich et al. in [117] vorgestellt. Der Anteil der oxidierten Kristalloberfläche wird von Ulrich et al. mit 20 % bei der Sauerstoff-Dosis von 60 L angegeben. Auch in diesen Experimenten wird beobachtet, dass die Kristallstruktur der Teilflächen der des kompletten Alumina-Films entspricht.

# Kapitel 6

## Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden Experimente zur Wechselwirkung von schnellen Atomen mit Oberflächen von Oxidkristallen, Metallkristallen und ultradünnen Oxidfilmen auf Metalloberflächen vorgestellt. Die Experimente wurden im Regime der streifenden Streuung für Energien im keV-Bereich durchgeführt. Diese Geometrie bietet den Vorteil einer außerordentlich hohen Oberflächen-sensitivität und somit die Möglichkeit, die kristallographischen Eigenschaften der obersten Atomlage zu untersuchen. Darüber hinaus wurden Experimente zur Bestimmung des Energieverlusts der an den verschiedenen Oberflächen gestreuten Projektile und zur, durch diese Projektile induzierten, Elektronenemission durchgeführt. Die Projektilenergie wird in den Untersuchungen zu dieser Arbeit über die Flugzeit der Projektile bestimmt. Diese Methode ermöglicht, im Gegensatz zu Energieanalysatoren die auf der Ablenkung geladener Teilchen in elektromagnetischen Feldern beruhen, die Bestimmung der Energie von neutralen Projektilen. Der Kernpunkt der verwendeten Messapparatur ist die koinzidente Messung des Energieverlusts eines Projektils und der Anzahl der durch die Streuung dieses Projektils emittierten Elektronen. Es ist möglich, Aussagen über sehr kleine Elektronenausbeuten und über den Energieverlust pro emittiertem Elektron zu treffen.

In Kapitel 3 wurden Experimente an  $\text{MgO}(001)$  und  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  vorgestellt. Um Experimente im Regime der streifenden Streuung durchführen zu können, ist eine hinreichende Oberflächenqualität zu gewährleisten. Dafür war es nötig, die Kristalle bei Temperaturen von bis zu 2000 K auszuheilen. Ein für diesen Zweck geeigneter Elektronenstoßheizer ist in Abschnitt 2.2.2 beschrieben. Die Breite der polaren Streuwinkelverteilungen konnte von ca.  $2^\circ$  auf etwa  $0,2^\circ$  reduziert werden. Daraus kann auf nahezu defektfreie Oberflächen für die  $\text{MgO}(001)$ - und  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ -Kristalle geschlossen werden [83].

Es wurden Experimente zum Wachstum von  $V_xO_y$  auf  $MgO(001)$  präsentiert.  $V_xO_y$  wächst lagenweise auf  $MgO(001)$ , dies wurde durch Registrierung der streifend reflektierten Ionenintensität nachgewiesen. Weitergehende Untersuchungen mit Standardmethoden der Oberflächenphysik sind jedoch wegen an der Aufladung des  $MgO(001)$ -Substrates während der auf der Wechselwirkung mit Elektronen basierenden Experimente (LEED, AES) nicht möglich.

Deshalb wurde an der  $MgO(001)$ -Oberfläche die erst kürzlich entdeckte Methode der Beugung schneller Atome (fast atom diffraction, FAD) angewandt. Ein Vorteil dieser Methode ist die Verwendung neutraler Atome, deshalb spielen Aufladungseffekte keine Rolle. Außerdem werden nur sehr geringe Teilchenanzahlen an den Oberflächen gestreut, die Methode ist deshalb weitgehend zerstörungsfrei. Weil Projektile mit Energien im keV-Bereich benutzt werden, ist eine effiziente Detektion der Projektile mit dem Channelplate-Detektor auch für sehr geringe Ströme gewährleistet. Aus den Abständen der Intensitätsmaxima der gebeugten Atome konnten die Kanalbreiten für die  $\langle 100 \rangle$  und die  $\langle 110 \rangle$  - Richtung des  $MgO(001)$  experimentell bestimmt werden. Die experimentellen Werte stimmen gut mit den theoretisch berechneten Kanalbreiten überein. Damit wurde die Eignung der FAD für Untersuchungen an Kristallen demonstriert, die mit Standardmethoden der Oberflächenphysik nicht untersuchbar sind.

Neben strukturellen Aussagen durch Experimente im Regime der streifenden Streuung können Aussagen über Wechselwirkungspotentiale getroffen werden. Dafür wurden gezielt Regenbogenstrukturen in den Streuverteilungen der gestreuten Projektile vermessen. Diese beinhalten detaillierte Informationen zum Wechselwirkungspotential zwischen Projektile und Oberflächenatomen. Mit dem Ziel, das Wechselwirkungspotential Ne-MgO zu untersuchen, wurden  $Ne^0$  -Projektile entlang niedrig indizierter Kristallrichtungen des  $MgO(001)$ -Kristalls gestreut und die dadurch experimentell erzeugten Streuverteilungen mit Trajektoriensimulationen auf Grundlage verschiedener Wechselwirkungspotentiale verglichen. Ähnlich wie bei den Untersuchungen an  $LiF(001)$  liefert das individuelle Wechselwirkungspotential von Gärtner [46] eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Werten.

Eine geplante Ausweitung der Studien an  $MgO(001)$  auf Untersuchungen zum Energieverlust und zur Elektronenemission von gestreuten Projektilen ließ sich aufgrund der Aufladung des Kristalls nicht realisieren. Die Aufladung äußert sich in einer zeitabhängige Veränderung der Elektronenzahlspektren. Untersuchungen zur Elektronenemission wurden deshalb an ultradünnen Oxidfilmen auf Metallsubstraten durchgeführt.

Die in Kapitel 4 beschriebenen Untersuchungen an  $Mo(112)$  teilen sich

in Experimente zur Klärung der geometrischen Struktur von ultradünnen Filme auf Mo(112) und in Untersuchungen zur Elektronenemission und zum Energieverlust der gestreuten Projektile auf.

Auf dem Mo(112) -Kristall wurde ein SiO-Film präpariert und mittels der Methode der Ionenstrahltriangulation untersucht. Es wurden experimentelle Ionenstrahltriangulationskurven mit Ionenstrahltriangulationskurven verglichen, die auf Grundlage der Strukturvorschläge von Chen et al. [22] und Sierka et al. [111] berechnet wurden. Die Struktur des SiO/Mo(112)-Films konnte eindeutig in Übereinstimmung mit dem 2D-Netzwerk-Modell von Sierka et al. beschrieben werden, der Vorschlag von Chen et al. kann ausgeschlossen werden.

Auf der Grundlage eines von Sierka et al. in [112] veröffentlichten Modells wurde für die p(1x2)O/Mo(112)-Struktur ein modifiziertes Modell erstellt. Dieses stimmt sehr gut mit den experimentellen Daten überein. Außerdem konnte aufgrund der experimentellen Ergebnisse Atompositionen zur p(2x3)O/Mo(112)-Struktur vorgeschlagen werden.

Eine weitere Fragestellung im Regime der streifenden Streuung ist der Einfluss der elektronischen Struktur der Oberfläche auf den Energieverlust der an der Oberfläche gestreuten Projektile. In Bezug auf die dünnen Filme auf Mo(112) stellte sich die Frage, ab welcher Dicke des Oxidfilm die metallischen Eigenschaften des Substrates vollständig unterdrückt sind. Die Untersuchungen zum Energieverlust von an den Adsorbaten auf Mo(112) gestreuten  $\text{He}^0$  -Projektile zeigen signifikante Unterschiede zur Streuung an der sauberen Mo(112)- Oberfläche. Bei der Streuung an der Sauerstoff bedeckten Oberfläche werden wesentlich kleinere Energieverluste gemessen. Außerdem werden bei der Streuung an p(1x2)O/Mo(112) größere Elektronenausbeuten als an Mo(112) bestimmt.

Klarere Strukturen ergeben sich bei den Untersuchungen zur Streuung von  $\text{He}^0$  an SiO/Mo(112) . Für jedes emittierte Elektron tritt ein diskreter Energieverlust auf. Zusätzlich können in den Energieverlustspektren Anregungen von Exzitonen nachgewiesen werden. Der Nachweis der Exzitonenanregung beweist die Existenz einer Bandlücke und gibt Hinweise auf die elektronische Struktur des SiO-Films. Es konnte somit gezeigt werden, daß die zweilagigen SiO-Schicht die elektronischen Eigenschaften der Mo(112)-Oberfläche stark verändert. Die Oberfläche zeigt Eigenschaften, wie sie von oxidischen Einkristallen bekannt sind [62, 94].

In Kapitel 5 werden die Ergebnisse der Experimente an NiAl(110) und an  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110) vorgestellt. Es werden Untersuchungen zu der von Kresse et al. [60] vorgeschlagenen Anordnung der Atome in der zweilagigen Oxidschicht präsentiert. Mit der Methode der Ionenstrahltriangulation kann

ten jedoch keine diesbezüglichen Aussagen getroffen werden. Ursächlich hierfür ist die große Einheitszelle des Oxidfilms und die dichte Packung innerhalb der Einheitszelle. Für die Ionenstrahltriangulation ist aber das Channeling in einem Kanal von mindestens 100 Å nötig.

Die Experimente zur Elektronenemission und zum Energieverlust zeigen ähnliche Ergebnisse wie bei der Streuung am SiO-Film auf Mo(112). Zur Emission eines Elektrons werden 11 eV aufgebracht. In den Energieverlustspektren werden excitonische Anregungen identifiziert. Der Energieverlust zur Anregung eines Exzitons beträgt ca. 11 eV, in der Literatur finden sich Angaben zur Bandlücke im Alumina-Film von etwa 7-8 eV [3, 99].

In den Untersuchungen, die in Abhängigkeit von der Bedeckung der NiAl - Oberfläche mit dem Alumina-Film durchgeführt wurden, zeigt sich, dass auch bei sehr geringen Dosen an Sauerstoff der Film in Teilbereichen vollständig ausgebildet ist. Dieses Resultat deckt sich mit Ergebnissen von Ulrich et al. [117]. In den Untersuchungen an den unvollständig bedeckten Oberflächen zeigt sich, dass zwei Klassen von Streuereignissen stattgefunden haben müssen. Zum einen werden die Projektile an der sauberen NiAl(110)-Oberfläche und zum anderen an der  $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$  / NiAl(110)-Oberfläche gestreut.



# Danksagung

Ich danke Herrn Prof. Dr. Winter für die interessante Aufgabenstellung und für die Möglichkeit diese Dissertation am Lehrstuhl für Physik der Grenzflächen und dünnen Schichten bearbeiten zu können.

Ich bedanke mich besonders bei Herrn Dr. Stephan Wethekam für die vielen anregenden Gespräche und Diskussionen, für die Einführung in die Geheimnisse des Computerprogramms zur Trajektorien-simulation und nicht zuletzt für die Hilfe bei der Korrektur des Manuskripts dieser Arbeit.

Ich bedanke mich bei Herrn Dr. Marco Busch für die vielen Gespräche und die Zusammenarbeit bei den verschiedensten Projekten in den vergangenen Jahren.

Ich bedanke mich besonders bei Herrn Maass für die unzähligen Hilfestellungen und Reparaturen. Außerdem bedanke ich mich für die vielen hoch-aufgelösten Diskussionen jenseits der Physik.

Ich bedanke mich bei Herrn Andreas Schüller für die gemeinsame Zeit seit dem ersten Tag des Studiums und die Zusammenarbeit bei den Untersuchungen an Magnesiumoxid.

Bei Herrn Jan Seifert bedanke ich mich für die Zusammenarbeit bei den Experimenten am Molybdän und die vielen Diskussionen die sich mit der Triangulation befassten.

Ich bedanke mich bei Herrn Dr. Axel Mertens für die geduldige Einführung zu Beginn meiner Zeit in der Arbeitsgruppe und die Zusammenarbeit an der EZR-II-Kammer.

Ich bedanke mich bei Herrn Ralph-Andreas Noack und bei Herrn Lindenberg für die Hilfe bei der Umsetzung der vielen kleinen und großen Ideen.

Bei allen bereits erwähnten und auch bei allen nicht genannten Kollegen möchte ich mich für das gute Arbeitsklima und die gute Zusammenarbeit innerhalb der Arbeitsgruppe bedanken, die durch große Hilfsbereitschaft gekennzeichnet war und ist. Sie alle haben einen großen Anteil daran, dass mir die Zeit als Doktorand in guter Erinnerung bleiben wird.

Ich danke der *IMPRS for Complex Surfaces in Material Science* für die für die finanzielle und ideelle Unterstützung während der Promotion. Ins-

besondere bedanke ich mich bei Herrn Prof. Dr. Hans-Joachim Freund und Herrn Dr. Thomas Risse.

Bedanken möchte ich mich bei meinen Eltern, die mir alle Möglichkeiten geboten haben und meinen Wunsch Physik zu studieren klaglos akzeptierten und mich dabei immer unterstützt haben.

# Literaturverzeichnis

- [1] A.BENSCH ; MERTENS, A.: *persönliche Mitteilung*. 2003. – privat
- [2] ADVANCED CERAMICS CORP.: <http://www.advceramics.com> / Advanced Ceramics Corp. 2005 (.). – Forschungsbericht. – .
- [3] ANDERSSON, S. ; BRÜHWILER, P. A. ; SANDELL, A. ; FRANK, M. ; LIBUDA, J. ; GIERTZ, A. ; BRENA, B. ; MAXWELL, A. J. ; BÄUMER, M. ; FREUND, H. J. ; MÅRTENSSON, N.: Metal-oxide interaction for metal clusters on a metal-supported thin alumina film. In: *Surface Science* 442 (1999), November, Nr. 1, L964–L970. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-40PXT75-5/2/486f3f7eef1c006ad6e06b3b8aa60a97>. – ISSN 0039–6028
- [4] ARGILE, C. ; RHEAD, G. E.: Adsorbed layer and thin film growth modes monitored by Auger electron spectroscopy. In: *Surface Science Reports* 10 (1989), November, Nr. 6-7, 277–356. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVY-46GCXWV-9/2/7a37838f5c60a0038fd2ebb4d17ad5ba>. – ISSN 0167–5729
- [5] AUTH, C.: *Wechselwirkung von Atomen und Ionen mit Metall- und Isolatoroberflächen bei der streifenden Streuung*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diss., 1996
- [6] BARAGIOLA, R. A. ; ALONSO, E. V. ; FLORIO, A. O.: Electron emission from clean metal surfaces induced by low-energy light ions. In: *Phys. Rev. B* 19 (1979), Januar, Nr. 1, 121–. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v19/p121>
- [7] BERNHARD, T. ; WINTER, H.: Monitoring growth of ultrathin films via ion-induced electron emission. In: *Phys. Rev. B* 71 (2005), Juni, Nr. 24, 241407–. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v71/e241407>

- [8] BERNHARD, Tobias: *Untersuchung elektronischer Anregungs- und Beugungseffekte sowie Wachstum, Struktur und magnetischer Eigenschaften ultradünner 3d-Metallfilme auf Cu(001) mittels streifender Ionenstreuung*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diss., 2006
- [9] BESENBACHER, Flemming ; NØRSKOV, Jens K.: Oxygen chemisorption on metal surfaces: General trends for Cu, Ni and Ag. In: *Progress in Surface Science* 44 (1993), September, Nr. 1, 5–66. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TJF-46G51V9-J/2/a65939977d398db65f041933ef62e83b>. – ISSN 0079–6816
- [10] BLAUTH, D.: *Elektronenemission und Energieverlust bei streifender Streuung schneller Atome an Metalloberflächen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diplomarbeit, 2003
- [11] BLUM, Ralf-Peter ; AHLBEHRENDT, Dirk ; NIEHUS, Horst: Growth of Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> stripes in NiA(001). In: *Surface Science* 396 (1998), Januar, Nr. 1-3, 176–188. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-3YXJC03-46/2/5ae23cd3858e234eec1858d361f1bba0>. – ISSN 0039–6028
- [12] BORISOV, A. G. ; MERTENS, A. ; WINTER, H. ; KAZANSKY, A. K.: Evidence for the Stopping of Slow Ions by Excitations of Optical Phonons in Insulators. In: *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999), Dezember, Nr. 25, 5378–. <http://link.aps.org/abstract/PRL/v83/p5378>
- [13] BRUSDEYLINS, G. ; DOAK, R.Bruce ; SKOFRONICK, J.G. ; TOENNIES, J.Peter: Elastic and inelastic scattering of He atoms from the (001) crystal surface of MgO. In: *Surface Science* 128 (1983), Mai, Nr. 1, 191–206. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-46T3BD7-201/2/1701534d1dfa10fe7c210f240a530cc9>. – ISSN 0039–6028
- [14] BUSCH, M. ; BLAUTH, D. ; WINTER, H.: Adsorption and NiO(1 0 0) formation by atomic and molecular oxygen on Ni(1 1 0). In: *Surface Science* 602 (2008), August, Nr. 16, 2808–2815. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-4SYJS2K-4/2/afd2d7d60756964f3d066bb499ad2936>. – ISSN 0039–6028
- [15] BUSCH, Marco ; GRUNDMANN, Henrik ; SPECHT, Uwe: *private Mitteilung*. .. – privat

- [16] BUSCH, Marco ; GRUYTERS, Markus: *private Mitteilung*. .. – privat
- [17] CAMPBELL, Charles T.: Ultrathin metal films and particles on oxide surfaces: structural, electronic and chemisorptive properties. In: *Surface Science Reports* 27 (1997), Nr. 1-3, 1–111. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVY-3SP1TBH-2/2/544066745a28b29a4f604a3658131631>. – ISSN 0167–5729
- [18] CANBERRA: Edition Ten Product Katalog / CANBERRA. 1997 (.). – Forschungsbericht. – .
- [19] CANBERRA: Datenblatt: PIPS Detektor, Modell: BK/P8-100-12-300-AM / CANBERRA. 1998 (.). – Forschungsbericht. – .
- [20] CAUSÀ, M. ; DOVESI, R. ; PISANI, C. ; ROETTI, C.: AB initio hartree-fock study of the MgO(001) surface. In: *Surface Science* 175 (1986), Oktober, Nr. 3, 551–560. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-46PB7DG-1K/2/c7419b30d16b3cda58a6c87b497b2a47>. – ISSN 0039–6028
- [21] CHAMBERS, Scott A.: Epitaxial growth and properties of thin film oxides. In: *Surface Science Reports* 39 (2000), August, Nr. 5-6, 105–180. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVY-40V4FK7-2/2/6b225b5ca1c6037b37bb1eef8010fe6a>. – ISSN 0167–5729
- [22] CHEN, M.S. ; WALLACE, W.T. ; KUMAR, D. ; YAN, Z. ; GATH, K.K. ; CAI, Y. ; KURODA, Y. ; GOODMAN, D.W.: Synthesis of well-ordered ultra-thin titanium oxide films on Mo(1 1 2). In: *Surface Science* 581 (2005), Mai, Nr. 2-3, 115–121. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-4FPJ772-3/2/426edc6c0ed5c652f9f05a3c57422226>
- [23] CRYSTEC GMBH: <http://www.crystec.de/daten/al2o3.pdf> / CrysTec GmbH. 2008 (.). – Forschungsbericht. – .
- [24] CRYSTEC GMBH: <http://www.crystec.de/daten/mgo.pdf> / CrysTec GmbH. 2008 (.). – Forschungsbericht. – .
- [25] DANAILOV, D. ; RECHTIEN, J. H. ; SNOWDON, K. J.: Scattering of energetic beams at glancing incidence from crystal surfaces: a molecular dynamics simulation. In: *Surface Science* 259 (1991), Dezember,

- Nr. 3, 359–370. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-46T3BFH-20W/1/975c42e254fc1371ff64b0edd3d36897>
- [26] DAVIS, L.A. ; MCDONALD, N.C. ; PALMBERG, P.W. ; RACH, G.B. ; WEBER, R.E.: *Handbook of Auger Electron Spectroscopy (2nd ed.)*. Perkin Elmer, Eden Prairie, MN, 1978
- [27] DESJONQUERES, M. ; SPANJAARD, D.: *Concepts in Surface Physics, 2nd ed.* Springer, New York, 1996
- [28] ENGEL, T. ; RIEDER, K.H. ; BATRA, I.P.: A helium diffraction study of O<sub>2</sub> chemisorption on Ni(110). In: *Surface Science* 148 (1984), Dezember, Nr. 2-3, 321–337. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-46SWRHW-JN/2/5b751651baffa4d9bcc908edf5250deb>. – ISSN 0039–6028
- [29] ERGINSOY, Cavid: Anisotropic Effects in Interactions of Energetic Charged Particles in a Crystal Lattice. In: *Phys. Rev. Lett.* 15 (1965), August, Nr. 8, 360–. <http://link.aps.org/abstract/PRL/v15/p360>
- [30] ERTL, G.: Reactions at Surfaces: From Atoms to Complexity (Nobel Lecture). In: *Angew. Chem.* 47 (2008), S. 3524
- [31] ERTL, Gerhard ; FREUND, Hans-Joachim: Catalysis and Surface Science. In: *Phys. Today* 52 (1999), Januar, Nr. 1, 32–38. <http://link.aip.org/link/?PTO/52/32/1>
- [32] FARIAS, Daniel ; RIEDER, Karl-Heinz: Atomic beam diffraction from solid surfaces. In: *Reports on Progress in Physics* 61 (1998), Nr. 12, S. 1575–1664. – ISSN 0034–4885
- [33] FELDMAN, L.C. ; MAYER, J. W.: *Fundamentals of Surface and thin film analysis*. North Holland, 1986
- [34] FOWLER, P. W. ; TOLE, P.: Effects of coordination number on surface ions: an ab initio study of LiF and MgO. In: *Surface Science* 197 (1988), Nr. 3, 457–473. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-46X2YYW-1Y/2/98eda88f0a163f559b8f2582fc41eb62>. – ISSN 0039–6028
- [35] FRANCHY, René: Growth of thin, crystalline oxide, nitride and oxynitride films on metal and metal alloy surfaces. In: *Surface Science Reports* 38 (2000), Juni, Nr. 6-8, 195–294. <http://www.sciencedirect.com/science/article/>

B6TVY-40CS20V-1/2/1abf3e7e91f8523dcf4afe7343869357. – ISSN 0167-5729

- [36] FREUND, H.-J.: Principles of Chemisorption. In: *Handbook of Heterogeneous Catalysis* Volume 3, Chapter 5.1.1 (2008), S. 1375–1415
- [37] FREUND, H.-J. ; GOODMAN, D. W.: Ultrathin Oxide Films. In: *Handbook of Heterogeneous Catalysis* Volume 3, Chapter 4.5 (2008), S. 1309–1338
- [38] FREUND, Hans-Joachim: Clusters and islands on oxides: from catalysis via electronics and magnetism to optics. In: *Surface Science* 500 (2002), März, Nr. 1-3, 271–299. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-442HRJ6-P/2/01d6344266548b2c4b22acf8b3954191>. – ISSN 0039-6028
- [39] FREYSOLDT, Christoph ; RINKE, Patrick ; SCHEFFLER, Matthias: Ultrathin Oxides: Bulk-Oxide-Like Model Surfaces or Unique Films? In: *Physical Review Letters* 99 (2007), Nr. 8, 086101. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.086101>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.99.086101
- [40] FRÉMY, Nicolas ; MAURICE, Vincent ; MARCUS, Philippe: Initial Stages of Growth of Alumina on NiAl(001) at 1025 K. In: *Journal of the American Ceramic Society* 86 (2003), Nr. 4, 669–75. <http://dx.doi.org/10.1111/j.1151-2916.2003.tb03356.x>
- [41] GAUTIER, Martine ; FENAUD, Gilles ; VAN, Laurent P. ; VILLETTE, Bruno ; POLLAK, Maud ; THROMAT, Nathalie ; JOLLET, François ; DURAUD, Jean-Paul:  $\alpha$  - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> (0001) Surfaces: Atomic and Electronic Structure. In: *Journal of the American Ceramic Society* 77 (1994), Nr. 2, 323–334. <http://dx.doi.org/10.1111/j.1151-2916.1994.tb06999.x>
- [42] GEMMELL, D. S.: Channeling and related effects in the motion of charged particles through crystals. In: *Rev. Mod. Phys.* 46 (1974), S. 129
- [43] GERMER, L. H. ; MACRAE, A. U.: Oxygen-Nickel Structures on the (110) Face of Clean Nickel. In: *Journal of Applied Physics* 33 (1962), Nr. 10, 2923-2932. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1728537>. – DOI 10.1063/1.1728537

- [44] GMBH, VG I.: Operating Instruktionen CLAM 100, 1982 / VG INSTRUMENTS GmbH. 1982 (.). – Forschungsbericht. – .
- [45] GRUNDMANN, Henrik: *Klassische und quantenmechanische Regenbögen bei der streifenden Streuung schneller Atome und Moleküle an der sauberen und sauerstoffbedeckten Ni(110)-Oberfläche*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diplomarbeit, 2009
- [46] GÄRTNER, K.: *private Mitteilung*. .. – privat
- [47] HA, D. ; SHIN, D. ; KOH, G. H. ; LEE, J. ; LEE, S. ; AHN, Y. S. ; JEONG, H. ; CHUNG, T. ; KIM, K.: A cost effective embedded DRAM integration for high density memory and high performance logic using 0.15  $\mu\text{m}$  technology node and beyond. In: *IEEE Transactions on Electron Devices* 47 (2002), S. 1499
- [48] HECHT, T.: *Effekt der Bandstruktur von Cu(111)- und Cu(110)-Oberflächen auf den resonanten Ladungstransfer bei streifender Streuung*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diss., 2000
- [49] HENZLER, M. ; GÖPEL, W.: *Oberflächenphysik des Festkörpers*. B. G. Teubner, Stuttgart, 1994
- [50] HOEGEN, M. Horn-von: Spot profile analysis low energy electron diffraction of semiconductor growth. In: *Zeitschrift für Kristallographie* 214 (1999), S. 591–629 und 684–721
- [51] HOEGEN, Michael Horn-von: <http://www.ilp.physik.uni-essen.de/hvh/methodik/spaleed/spaleed.htm> / Universität Duisburg-Essen. 2009 (.). – Forschungsbericht. – .
- [52] IBACH, H. ; LÜTH, H.: *Festkörperphysik*. Springer-Verlag, Berlin, 2002
- [53] INFRAPOINT: Datenblatt INSPACTO HT (2008) / INFRAPOINT. 2008 (.). – Forschungsbericht. – .
- [54] JACKSON, D. P.: Approximate calculation of surface Debye temperatures. In: *Surf. Sci.* 43 (1974), S. 431
- [55] JAEGER, R. M. ; KUHLENBECK, H. ; FREUND, H. J. ; WUTTIG, M. ; HOFFMANN, W. ; FRANCHY, R. ; IBACH, H.: Formation of a well-ordered aluminium oxide overlayer by oxidation of NiAl(110). In: *Surface Science* 259 (1991), Dezember, Nr. 3, 235–252. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-46T3BFH-20H/2/394850086e4448066c4974b996e1566f>



- [56] JERRATSCH, J.-F. K.: *Elektronenemission bei streifender Streuung schneller Atome an Metalloberflächen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diplomarbeit, 2007
- [57] KAYA, S. ; WEISSENRIEDER, J. ; STACCHIOLA, D. ; TODOROVA, T.K. ; SIERKA, M. ; SAUER, J. ; SHAIKHUTDINOV, S. ; FREUND, H.-J.: Formation of one-dimensional molybdenum oxide on Mo(1 1 2). In: *Surface Science* 602 (2008), November, Nr. 21, 3338–3342. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-4TF7C6H-3/2/e869b99fe595c13a227151e152ded502>. – ISSN 0039–6028
- [58] KINNIBURGH, C G.: A LEED study of MgO(100). III. Theory at off-normal incidence. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* (1976), Nr. 14, 2695. <http://stacks.iop.org/0022-3719/9/2695>
- [59] KLEYN, A. W. ; HORN, T. C. M.: Rainbow scattering from solid surfaces. In: *Physics Reports* 199 (1991), Nr. 4, 191 - 230. [http://dx.doi.org/DOI:10.1016/0370-1573\(91\)90032-H](http://dx.doi.org/DOI:10.1016/0370-1573(91)90032-H). – DOI DOI:10.1016/0370-1573(91)90032-H. – ISSN 0370-1573
- [60] KRESSE, Georg ; SCHMID, Michael ; NAPETSCHNIG, Evelyn ; SHISHKIN, Maxim ; KOHLER, Lukas ; VARGA, Peter: Structure of the Ultrathin Aluminum Oxide Film on NiAl(110). In: *Science* 308 (2005), Nr. 5727, 1440–1442. <http://www.sciencemag.org/cgi/content/abstract/308/5727/1440>
- [61] LARSEN, P. K. ; DOBSON, P. J.: *Reflection High-Energy Electron Diffraction and Reflection Electron Imaging of Surfaces*. Plenum, New York, 1988
- [62] LEDERER, S.: *Flugzeitaufgelöste Studien zur Elektronenemission bei der streifenden Streuung schneller atomarer Projektile an Isolatoroberflächen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diplomarbeit, 2001
- [63] LEDERER, S. ; MAASS, K. ; BLAUTH, D. ; WINTER, H. ; WINTER, HP. ; AUMAYR, F.: Kinetic electron emission from the selvage of a free-electron-gas metal. In: *Phys. Rev. B* 67 (2003), März, Nr. 12, 121405-. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v67/e121405>
- [64] LEDERER, Sven: *Translationsenergie-Spektroskopie elektronischer Wechselwirkungen bei streifender Streuung schneller Atome an Festkörperoberflächen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diss., 2006

- [65] LEMELL, C. ; STOCKL, J. ; WINTER, HP. ; AUMAYR, F.: A versatile electron detector for studies on ion-surface scattering. In: *Review of Scientific Instruments* 70 (1999), Nr. 3, 1653-1657. <http://dx.doi.org/10.1063/1.1149647>. – DOI 10.1063/1.1149647
- [66] LESKELÄ, Markku ; RITALA, Mikko: Atomic layer deposition (ALD): from precursors to thin film structures. In: *Thin Solid Films* 409 (2002), April, Nr. 1, 138–146. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TW0-45CNBWD-J/2/064e8d8e5bb5ce63dd8beedc7d084de8>. – ISSN 0040–6090
- [67] LIBUDA, J. ; WINKELMANN, F. ; BAUMER, M. ; FREUND, H. J. ; BERTRAMS, Th. ; NEDDERMEYER, H. ; MULLER, K.: Structure and defects of an ordered alumina film on NiAl(110). In: *Surface Science* 318 (1994), Oktober, Nr. 1-2, 61–73. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-46R186B-2K/2/9d1d4c84d099b28b365e06e6fe6373eb>
- [68] LOSOVYJ, YaB: Adsorption of gadolinium on the Mo(112) crystal face. In: *Vacuum* 48 (1997), Nr. 3-4, 195–198. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TW4-3SP69Y4-4/2/c7e9f0d8cfb69a24587fea632a0d6d88>. – ISSN 0042–207X
- [69] MAASS, K.: *private Mitteilung*. .. – privat
- [70] MAASS, K. ; MERTENS, A. ; KERKOW, H.: Ein 350-kV-Beschleuniger für die Halbleiterforschung. In: *Exp. Techn. der Phys.* 30 (1982), S. 263
- [71] MARTIN, Anna J. ; BILZ, Heinz: Charge deformation and geometric relaxation at the (001) MgO surface. In: *Phys. Rev. B* 19 (1979), Juni, Nr. 12, 6593–. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v19/p6593>
- [72] MASEL, R. I.: *Principles of Adsorption and Reaction on Solid Surfaces*. Wiley, New York, 1996
- [73] MASUDA, S. ; NISHIJIMA, M. ; SAKISAKA, Y. ; ONCHI, M.: Structures of oxygen-covered Ni(110) surfaces. In: *Phys. Rev. B* 25 (1982), Januar, Nr. 2, 863–. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v25/p863>
- [74] MAY, J.W. ; GERMER, L.H.: Incipient oxidation of (110) nickel. In: *Surface Science* 11 (1968), August, Nr. 3, 443–464. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-46SXMCS-YT/2/685a0caed58190b68720af707d10c227>. – ISSN 0039–6028

- [75] MOLIERE, G.: Theorie der Streuung schneller geladener Teilchen I. Einzelstreuung am abgeschirmten Coulomb-Feld. In: *Z. Naturforsch.* 2a (1947), S. 133
- [76] NESTLER, Ruben: *Studien zur koinzidenten Elektronenemission bei streifender Ionen-Oberflächen-Streuung von schnellen Heliumatomen an Mo(112) und Al(100)*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diplomarbeit, 2009
- [77] O. MADELUNG, U. R. ; SCHULZ, M.: *Landolt-Börnstein - Group III Condensed Matter Numerical Data and Functional Relationships in Science and Technology II-VI and I-VII Compounds; Semimagnetic Compounds Volume 41B*. O. Madelung, U. Rössler and M. Schulz, 1999
- [78] O'CONNOR, D.J. ; BIRSACK, J.P.: Comparison of theoretical and empirical interatomic potentials. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 15 (1986), April, Nr. 1-6, 14–19. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TJN-470VG9H-1M0/2/88ddebbe85780b4313d22d00624f2ae3>. – ISSN 0168–583X
- [79] OKIMURA, Kunio ; FURUMI, Takahiro: Epitaxial Growth of Rutile TiO<sub>2</sub> Films on MgO Substrate in Inductively Coupled Plasma-Assisted Sputtering. In: *Japanese Journal of Applied Physics* 43 (2004), Nr. 5B, L655-L658. <http://dx.doi.org/10.1143/JJAP.43.L655>. – DOI 10.1143/JJAP.43.L655
- [80] OSHIMA, K. ; CRISTOLOVEANU, S. ; GUILLAUMOT, B. ; IWAI, H. ; DELEONIBUS, S.: Advanced SOI MOSFETs with buried alumina and ground plane: self-heating and short-channel effects. In: *Solid-State Electronics* 48 (2004), Juni, Nr. 6, 907–917. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TY5-4BMJSXX-5/2/af53b72a388591c48f1db03165709b2c>. – ISSN 0038–1101
- [81] PARANJPE, Ajit ; GOPINATH, Sanjay ; OMSTEAD, Tom ; BUBBER, Randhir: Atomic Layer Deposition of AlO[sub x] for Thin Film Head Gap Applications. In: *Journal of The Electrochemical Society* 148 (2001), Nr. 9, G465-G471. <http://dx.doi.org/10.1149/1.1385822>. – DOI 10.1149/1.1385822

- [82] PETUKHOV, Mikhail ; ANDREA RIZZI, G. ; GRANOZZI, Gaetano: Ultrathin film growth and spectroscopic characterization of VOx on Pt(1 1 1). In: *Surface Science* 490 (2001), September, Nr. 3, 376–384. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-43VT9C2-F/2/abad385f68acc5060a5acd3f588c5c>. – ISSN 0039–6028
- [83] PFANDZELTER, R.: Effects of defect structures at surfaces and thin films on grazing scattering of fast ions. In: *Phys. Rev. B* 57 (1998), Juni, Nr. 24, 15496–. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v57/p15496>
- [84] PFANDZELTER, R. ; MERTENS, A. ; WINTER, H.: Computer simulations on energy transfer of fast atoms to a crystal lattice under surface channeling. In: *Physics Letters A* 290 (2001), November, Nr. 3-4, 145–150. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVM-4489YF3-1/2/efebe2a25a6ad54eecebe1f7a4a6b238>
- [85] PHOTONIS: <http://www.photonis.com> / PHOTONIS. Version: 2001. <http://www.photonis.com>. 2001 (.). – Forschungsbericht. – .
- [86] PINTO, Henry P. ; NIEMINEN, R. M. ; ELLIOTT, Simon D.: Ab initio study of gamma - Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub> surfaces. In: *Phys. Rev. B* 70 (2004), September, Nr. 12, 125402–. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v70/e125402>
- [87] POELSEMA, B. (Hrsg.) ; COMSA, G. (Hrsg.): *Scattering of Thermal Energy Atoms from Disordered Surfaces, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 115*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg New York, 1989
- [88] PRESS, W. H. ; TEUKOLSKY, S. A. ; VETTERLING, W. T. ; FLANNERY, B. P.: *Numerical Recipes in C<sup>++</sup>*. Cambridge University Press, Cambridge, 2002
- [89] RATA, A. D. ; CHEZAN, A. R. ; HAVERKORT, M. W. ; HSIEH, H. H. ; LIN, H.-J. ; CHEN, C. T. ; TJENG, L. H. ; HIBMA, T.: Growth and properties of strained VOx thin films with controlled stoichiometry. In: *Phys. Rev. B* 69 (2004), Februar, Nr. 7, 075404–. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v69/e075404>
- [90] RATA, A. D. ; HIBMA, T.: Strain-induced properties of epitaxial VOx thin films. In: *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* 43 (2005), Januar, Nr. 2, 195–200. <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2005-00042-6>

- [91] RATA, A. D. ; VONGTRAGOO, S. ; BOERMA, D. O. ; HIBMA, T.: Stoichiometry determination of VO<sub>x</sub> thin films by 18O-RBS spectrometry. In: *Thin Solid Films* 400 (2001), Dezember, Nr. 1-2, 120–124. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TW0-44JYRMR-T/2/1d35ee01a04faf493e8b1af545afe572>. – ISSN 0040–6090
- [92] ROBINSON, Mark T. ; OEN, Ordean S.: Computer Studies of the Slowing Down of Energetic Atoms in Crystals. In: *Phys. Rev.* 132 (1963), Dezember, Nr. 6, 2385–. <http://link.aps.org/abstract/PR/v132/p2385>
- [93] ROENTDEK HANDELS GMBH: <http://www.roentdek.com> / Roentdek Handels GmbH. Version: 2009. <http://www.roentdek.com/>. 2009 (.). – Forschungsbericht. – .
- [94] RONCIN, P. ; VILLETTE, J. ; ATANAS, J. P. ; KHEMLICHE, H.: Energy Loss of Low Energy Protons on LiF(100): Surface Excitation and H-Mediated Electron Emission. In: *Phys. Rev. Lett.* 83 (1999), Juli, Nr. 4, 864–. <http://link.aps.org/abstract/PRL/v83/p864>
- [95] ROUSSEAU, P. ; KHEMLICHE, H. ; BORISOV, A. G. ; RONCIN, P.: Quantum Scattering of Fast Atoms and Molecules on Surfaces. In: *Physical Review Letters* 98 (2007), Nr. 1, 016104. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.98.016104>
- [96] SANTRA, A. K. ; MIN, B. K. ; GOODMAN, D. W.: Oxygen-induced O reconstruction. In: *Surface Science* 513 (2002), August, Nr. 3, L441–L444. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-461XMYD-B/2/387933e05dcb47ad3892ca1c8b17d73b>. – ISSN 0039–6028
- [97] SASAKI, Takehiko ; GOTO, Yoshio ; TERO, Ryugo ; FUKUI, Ken-ichi ; IWASAWA, Yasuhiro: Oxygen adsorption states on Mo(1 1 2) surface studied by HREELS. In: *Surface Science* 502-503 (2002), April, 136–143. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-44VX3WR-4/2/159e20fa5bb78d0f03cbe79fe9b35798>. – ISSN 0039–6028
- [98] SAWATZKY, G. A. ; POST, D.: X-ray photoelectron and Auger spectroscopy study of some vanadium oxides. In: *Phys. Rev. B* 20 (1979), August, Nr. 4, 1546–. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v20/p1546>

- [99] SCHMID, M. ; SHISHKIN, M. ; KRESSE, G. ; NAPETSCHNIG, E. ; VARGA, P. ; KULAWIK, M. ; NILIUS, N. ; RUST, H.-P. ; FREUND, H.-J.: Oxygen-Deficient Line Defects in an Ultrathin Aluminum Oxide Film. In: *Physical Review Letters* 97 (2006), Nr. 4, 046101. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.97.046101>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.97.046101
- [100] SCHROEDER, T. ; GIORGI, J. B. ; HAMMOUDEH, A. ; MAGG, N. ; BÄUMER, M. ; FREUND, H.-J.: Oxygen-induced p(2x3) reconstruction on Mo(112) studied by LEED and STM. In: *Phys. Rev. B* 65 (2002), März, Nr. 11, 115411–. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v65/e115411>
- [101] SCHÜLLER, A. ; ADAMOV, G. ; WETHEKAM, S. ; MAASS, K. ; MERTENS, A. ; WINTER, H.: Dynamic dependence of interaction potentials for keV atoms at metal surfaces. In: *Physical Review A (Atomic, Molecular, and Optical Physics)* 69 (2004), Nr. 5, 050901. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.69.050901>
- [102] SCHÜLLER, A. ; BUSCH, M. ; SEIFERT, J. ; WETHEKAM, S. ; WINTER, H. ; GARTNER, K.: Superstructures of oxygen and sulphur on a Fe(110) surface via fast atom diffraction. In: *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)* 79 (2009), Nr. 23, 235425. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.79.235425>
- [103] SCHÜLLER, A. ; WETHEKAM, S. ; WINTER, H.: Diffraction of Fast Atomic Projectiles during Grazing Scattering from a LiF(001) Surface. In: *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007), Januar, Nr. 1, 016103–4. <http://link.aps.org/abstract/PRL/v98/e016103>
- [104] SCHÜLLER, A. ; WINTER, H.: Diffraction of fast atoms under axial surface channeling conditions. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 267 (2009), Februar, Nr. 4, 628–633. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TJN-4V4KPKG-1/2/9c62e9edb3e84ec1548d90146ec0eb30>. – ISSN 0168–583X
- [105] SCHÜLLER, Andreas: *Untersuchung des interatomaren Wechselwirkungspotentials bei axialer Oberflächengitterführung*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diplomarbeit, 2004

- [106] SEIFERT, J. ; BLAUTH, D. ; WINTER, H.: Evidence for 2D-Network Structure of Monolayer Silica Film on Mo(112). In: *Physical Review Letters* 103 (2009), Nr. 1, 017601. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.103.017601>. – DOI 10.1103/PhysRevLett.103.017601
- [107] SEIFERT, Jan: *private Mitteilung.* .. – privat
- [108] SEIFERT, Jan ; WINTER, H.: *unveröffentlicht.* .. – privat
- [109] SHAIKHUTDINOV, S. ; BARON, M. ; NILIUS, N. ; FREUND, H. J.: *persönliche Mitteilung.* 2003. – privat
- [110] SI SCIENTIFIC INSTRUMENTS GMBH: <http://www.si-gmbh.de/> / SI Scientific Instruments GmbH. Version: 2004. <http://www.si-gmbh.de/>. 2004 (.). – Forschungsbericht. – .
- [111] SIERKA, Marek ; TODOROVA, Tanya K. ; KAYA, Sarp ; STACCHIOLA, Dario ; WEISSENRIEDER, Jonas ; LU, Junling ; GAO, Hongjun ; SHAIKHUTDINOV, Shamil ; FREUND, Hans-Joachim ; SAUER, Joachim: Interplay between theory and experiment in the quest for silica with reduced dimensionality grown on a Mo(1 1 2) surface. In: *Chemical Physics Letters* 424 (2006), Nr. 1-3, 115–119. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TFN-4JTXCT7-5/2/f58c6c1cab39b140357693e9ac13fee5>
- [112] SIERKA, Marek ; TODOROVA, Tanya K. ; SAUER, Joachim ; KAYA, Sarp ; STACCHIOLA, Dario ; WEISSENRIEDER, Jonas ; SHAIKHUTDINOV, Shamil ; FREUND, Hans-Joachim: Oxygen adsorption on Mo(112) surface studied by ab initio genetic algorithm and experiment. In: *The Journal of Chemical Physics* 126 (2007), Nr. 23, 234710. <http://dx.doi.org/10.1063/1.2743427>. – DOI 10.1063/1.2743427
- [113] SOARES, E. A. ; VAN HOVE, M. A. ; WALTERS, C. F. ; MCCARTY, K. F.: Structure of the alpha -Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>(0001) surface from low-energy electron diffraction: Al termination and evidence for anomalously large thermal vibrations. In: *Phys. Rev. B* 65 (2002), April, Nr. 19, 195405–. <http://link.aps.org/abstract/PRB/v65/e195405>
- [114] SOUSA, C. ; MEJÍAS, J. A. ; PACCHIONI, G. ; ILLAS, F.: Role of surface heterogeneity in the chemical bond of MgO: ionic character of regular and defect surface sites. In: *Chemical Physics Letters* 249 (1996), Januar, Nr. 1-2, 123–129. <http://www.sciencedirect.com/science/article/>

B6TFN-3TJ5JRM-1P/2/e7b12c7c252c242a218ee50fbfd20603. –  
ISSN 0009-2614

- [115] TODOROVA, T.K. ; SIERKA, M.: *private Mitteilung.* .. – privat
- [116] TRAEGER, Franziska: Helium Atom Scattering from Oxide Surfaces. In: *ChemPhysChem* 7 (2006), Nr. 5, 1006–1013. <http://dx.doi.org/10.1002/cphc.200500599>
- [117] ULRICH, Stefan ; NILIUS, Niklas ; FREUND, Hans-Joachim: Growth of thin alumina films on a vicinal NiAl surface. In: *Surface Science* 601 (2007), Oktober, Nr. 19, 4603–4607. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-4P961X5-1/2/a91bfefb59f3adb4e93010acc495c5256>. – ISSN 0039-6028
- [118] WELTON-COOK, M R. ; BERNDT, W: A LEED study of the MgO (100) surface: identification of a finite rumple. In: *Journal of Physics C: Solid State Physics* (1982), Nr. 27, 5691. <http://stacks.iop.org/0022-3719/15/5691>
- [119] WETHEKAM, S. ; WINTER, H.: Effect of thermal vibrations and their correlations on grazing scattering of atoms from crystal surfaces. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 258 (2007), Mai, Nr. 1, 48–51. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TJN-4MMPNDK-6/2/3176c82f5915f751b00c8088b8520b18>
- [120] WETHEKAM, Stephan: *Ladungsaustausch schneller Edelgasatome und Fullerene mit Festkörperoberflächen*, Humboldt-Universität zu Berlin, Diss., 2009
- [121] WINKELMANN, F. ; WOHLRAB, S. ; LIBUDA, J. ; BÄUMER, M. ; CAPPUS, D. ; MENGES, M. ; AL-SHAMERY, K. ; KUHLENBECK, H. ; FREUND, H.-J.: Adsorption on oxide surfaces: structure and dynamics. In: *Surface Science* 307-309 (1994), April, Nr. Part 2, 1148–1160. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVX-4CM9J6F-38/2/ad30a1f11ba57a709db5e305f255da9c>. – ISSN 0039-6028
- [122] WINTER, H.: Collisions of atoms and ions with surfaces under grazing incidence. In: *Physics Reports* 367 (2002), September, Nr. 5, 387–582. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TVP-45H96JF-1/2/d10cfd54c79683fa3e7afa6d0a1ea41c>



- [123] WINTER, H. ; SCHULLER, A.: Rainbow scattering under axial surface channeling. In: *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms* 232 (2005), Mai, Nr. 1-4, 165–172. <http://www.sciencedirect.com/science/article/B6TJN-4G1WXXY-H/2/6c63730c2064491c9dd3c616396e26c0>
- [124] WINTER, H. ; WINTER, H. P.: Classical model of kinetic electron emission near threshold induced by impact of atomic projectiles on a free-electron gas metal. In: *EPL (Europhysics Letters)* 62 (2003), Nr. 5, 739–. <http://iopscience.iop.org/0295-5075/62/5/739/cites>. – ISSN 0295–5075
- [125] WINTER, Hans: *Sekundärelektronenemission bei Oberflächengitterführung leichter Ionen an Ni*, München, Diss., 1986
- [126] WU, Ming-Cheng ; ESTRADA, Cesar A. ; CORNEILLE, Jason S. ; GOODMAN, D. W.: Model surface studies of metal oxides: Adsorption of water and methanol on ultrathin MgO films on Mo(100). In: *The Journal of Chemical Physics* 96 (1992), Nr. 5, 3892–3900. <http://dx.doi.org/10.1063/1.461893>. – DOI 10.1063/1.461893
- [127] XU, C. ; GOODMAN, D. W.: Handbook of Heterogeneous Catalysis. In: *Handbook of Heterogeneous Catalysis* Volume 2 (1997), S. 826
- [128] ZIEGLER, J. F. ; BIRSACK, J. P. ; LITTMARK, U.: *The Stopping and Range of Ions in Solids, Vol. 1*. Pergamon Press, New York, 1985



# Publikationen des Autors

1. S. LEDERER; K. MAASS; D. BLAUTH; H. WINTER; HP. WINTER; F. AUMAYR: Kinetic electron emission from the selvage of a free-electron gas metal. In: *Phys. Rev. B* **67** (2003), S. 121405
2. K. CZERSKI; A. HUK; L. MARTIN; N. TARGOSZ; D. BLAUTH; A. GORSKA; P. HEIDE; H. WINTER: Measurements of enhanced electron screening in d+d reactions under UHV conditions. In: *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* **35** (2008), S. 014012
3. M. BUSCH; D. BLAUTH; H. WINTER: Adsorption and NiO(100) formation by atomic and molecular oxygen on Ni(110). In: *Surface Science* **602** (2008), S. 2808
4. J. SEIFERT, D. BLAUTH, AND H. WINTER: Evidence for 2D-network structure of monolayer silica film on Mo(112). In: *Phys. Rev. Lett.* **103** (2009), S. 017601
5. H. WINTER; J. SEIFERT; D. BLAUTH; M. BUSCH; A. SCHÜLLER; S. WETHEKAM: Determination of the structure of ultrathin oxide layers on metal surfaces using grazing scattering of fast atoms. In: *Appl. J. Phys.* **256** (2009), S. 365



# Abbildungsverzeichnis

1.1	Schematische Darstellung der Trajektorien bei der streifenden Streuung . . . . .	2
2.1	Relative Energieschärfe $\Delta E/E$ . . . . .	8
2.2	Skizze der UHV-Apparatur . . . . .	9
2.3	Schnitt durch die UHV-Apparatur . . . . .	10
2.4	Schaltung für die Koinzidenzmessung . . . . .	12
2.5	Aufbau des Elektronendetektors . . . . .	13
2.6	Skizze des Boraelectric Heizers . . . . .	14
2.7	Skizze des Elektronenstoßheizers . . . . .	15
2.8	Geometrie der streifenden Streuung . . . . .	17
2.9	Charakteristische Strukturen polarer Winkelverteilungen . . . .	18
2.10	Polare Winkelverteilungen vor und nach der Präparation . . . .	18
2.11	Targetstromkurve . . . . .	19
2.12	Ionenstrahltriangulation . . . . .	20
2.13	Elektronenzahlspektrum . . . . .	21
2.14	Halbwertsbreite des [01 . . . . .	21
2.15	Prinzipskizze zum Auger Effekt . . . . .	23
2.16	Prinzipskizze des CLAM 100 . . . . .	23
2.17	Transmission des Energieanalysators . . . . .	24
2.18	SPA-LEED Prinzipskizze, Ewaldkonstruktion . . . . .	25
3.1	Streuverteilungen für 23,5 keV $\text{Ar}^0$ an $\text{MgO}(001)$ . . . . .	28
3.2	LEED-Aufnahme an $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ . . . . .	30
3.3	Augerelektronenspektroskopie an $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ . . . . .	30
3.4	Streuverteilungen für 23,5 keV $\text{Ar}^0$ an $\text{Al}_2\text{O}_3$ und $\text{MgO}$ . . . .	31
3.5	Elektronenemissionsspektren an $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ . . . . .	32
3.6	Elektronenemission an $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ . . . . .	33
3.7	Wachstumskurven für $\text{V}_x\text{O}_y$ auf $\text{MgO}$ . . . . .	35
3.8	Augerspektrum für 5 Monolagen $\text{V}_x\text{O}_y$ auf $\text{MgO}$ . . . . .	36
3.9	Skizze der Streugeometrie für die Regenbogenstreuung . . . . .	39

3.10	Streuung von 0,5 keV $H_2$ entlang $\langle 110 \rangle$ MgO(001) . . . . .	40
3.11	Kanalbreite d des $\langle 100 \rangle$ - und des $\langle 110 \rangle$ -Kanals . . . . .	41
3.12	Ne (4,0 keV) an MgO(001) entlang $\langle 100 \rangle$ . . . . .	43
3.13	Ne an MgO . . . . .	44
3.15	Intensität der Ne-Projektile an $\langle 100 \rangle$ -MgO . . . . .	46
3.14	Streuung von Ne (16,0 keV) an $\langle 100 \rangle$ -MgO . . . . .	46
3.16	Regenbogenwinkel für die Streuung von Ne an MgO . . . . .	48
3.17	Streuverteilungen für die Streuung von Ne an MgO(001) entlang der $\langle 110 \rangle$ -Richtung . . . . .	49
3.18	Projektion der Streuverteilungen an MgO(001) entlang $\langle 110 \rangle$ . . . . .	50
4.1	Darstellung der der Kristallstruktur von Mo(112) . . . . .	53
4.2	LEED-Aufnahme und AES an Mo(112) . . . . .	54
4.3	Streuwinkelverteilungen an Mo(112) und SiO/Mo(112) . . . . .	55
4.4	Augerelektronenspektroskopie an Adsorbaten auf Mo(112) . . . . .	56
4.5	LEED-Aufnahmen an Adsorbaten auf Mo(112) . . . . .	58
4.6	Ionenstrahltriangulation an SiO/Mo(112) . . . . .	59
4.7	Ionenstrahltriangulation an Adsorbaten auf Mo(112) . . . . .	60
4.8	Ionenstrahltriangulation an Mo(112) . . . . .	61
4.9	simulierte Eindringtiefe, 25 keV $H^0$ an Mo(112) . . . . .	63
4.10	simulierte Eindringtiefe, 25 keV $H^0$ an Mo(112) . . . . .	64
4.11	experimentelle Elektronenzahlspektren, 25 keV $H^0$ an Mo(112) . . . . .	65
4.12	simulierte Elektronenzahlspektren, 25 keV $H^0$ an Mo(112) . . . . .	66
4.13	Ionenstrahltriangulation für die Streuung von 25keV $H^0$ an p(1x2)O/Mo(112) . . . . .	68
4.14	Strukturmodell für p(1x2)O/Mo(112) . . . . .	69
4.15	Position der Sauerstoffatome in der p(1x2)O/Mo(112) -Struktur . . . . .	70
4.16	Ionenstrahltriangulation für die Streuung von 25keV $H^0$ an p(1x2)O/Mo(112) . . . . .	71
4.17	Ionenstrahltriangulationskurven für die Streuung von 25keV $H^0$ an Mo(112) , p(2x3)O/Mo(112) und p(1x2)O/Mo(112) . . . . .	72
4.18	Strukturmodell für die p(2x3)O/Mo(112)-Struktur . . . . .	74
4.19	Ionenstrahltriangulation für die Streuung von 25keV $H^0$ an p(2x3)O/Mo(112) . . . . .	75
4.20	Energieverlustspektren für die Streuung von 1 keV $He^0$ an Mo(112) . . . . .	77
4.21	Energieverlustspektren für die Streuung von 1 keV $He^0$ an Mo(112) . . . . .	77
4.22	Energieverlust für die Streuung $He^0$ an Mo(112) ohne Elektronenemission . . . . .	78

4.23	Energieverlust für die Streuung $\text{He}^0$ an Mo(112) mit Elektronenemission . . . . .	80
4.24	Elektronenausbeute für die Streuung von $\text{He}^0$ an Mo(112) . . . . .	80
4.25	Energieverlustspektren für die Streuung von 1 keV $\text{He}^0$ an p(1x2)O/Mo(112) . . . . .	81
4.26	Energieverlustspektren für die Streuung von 1 keV $\text{He}^0$ an p(1x2)O/Mo(112) . . . . .	82
4.27	Energieverlust für die Streuung $\text{He}^0$ an p(1x2)O/Mo(112) ohne Elektronenemission . . . . .	83
4.28	Energieverlust für die Streuung $\text{He}^0$ an p(1x2)O/Mo(112) mit Elektronenemission . . . . .	84
4.29	Elektronenausbeute für die Streuung von $\text{He}^0$ an p(1x2)O/Mo(112) . . . . .	85
4.30	Energieverlustspektren für die Streuung von 1,5 keV $\text{He}^0$ an SiO/Mo(112) . . . . .	86
4.31	Energieverlustspektren für die Streuung von 1,5 keV $\text{He}^0$ an SiO/Mo(112) . . . . .	87
4.32	Energieverlust für die Streuung $\text{He}^0$ an SiO/Mo(112) ohne Elektronenemission . . . . .	88
4.33	Differenz der Energieverluste für Emission von Elektronen . . . . .	89
4.34	Differenz der Energieverluste für Anregung von Exzitonen . . . . .	90
4.35	Elektronenausbeute für die Streuung von $\text{He}^0$ an SiO/Mo(112) . . . . .	91
4.36	Exzitonen ausbeute für die Streuung von $\text{He}^0$ an SiO/Mo(112) . . . . .	91
5.1	Strukturmodell von NiAl . . . . .	94
5.2	Strukturmodell von Kresse et al. . . . .	96
5.3	LEED an NiAl(110) und $\text{Al}_2\text{O}_3$ /NiAl(110) . . . . .	97
5.4	Augerelektronenspektroskopie an $\text{Al}_2\text{O}_3$ (0001) . . . . .	97
5.5	Streuverteilung für Streuung H an NiAl und $\text{Al}_2\text{O}_3$ / NiAl . . . . .	98
5.6	Ionenstrahltriangulationskurve für die Streuung von $\text{H}^0$ an NiAl(110) und $\text{Al}_2\text{O}_3$ / NiAl . . . . .	99
5.7	Niedrig indizierte Richtungen für NiAl(110) und das Strukturmodell von Kresse et al. . . . .	100
5.8	Simulationen . . . . .	101
5.9	Strukturmodell von Kresse et al, um $66.2^\circ$ verdreht . . . . .	102
5.10	2-dim Darstellung von Energieverlust und Elektronenausbeute bei der Streuung von 10 keV $\text{He}^0$ an NiAl(110) . . . . .	104
5.11	Energieverlust und Elektronenemissionsausbeute für $\text{He}^0$ an NiAl(110) . . . . .	105
5.12	Trajektorien der $\text{He}^0$ -Projektile bei der Streuung an NiAl(110) . . . . .	105

5.13	Energieverlust und Elektronenausbeute als Funktion der Parallelgeschwindigkeit der Projektile . . . . .	106
5.14	Schnitte durch Fermikugel für Projektilgeschwindigkeit $v=0$ , $v=v_{th}$ und $v>v_{th}$ . . . . .	107
5.15	Elektronenausbeute $\gamma$ als Funktion der Projektilgeschwindigkeit	109
5.16	2-dim Darstellung von Energieverlust und Elektronenausbeute für die Streuung von 3 keV $\text{He}^0$ an $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ / $\text{NiAl}(110)$ .	112
5.17	Projektion der Intensitäten der 2-dim. Darstellung auf die Energieverlustachse 3 keV $\text{He}^0$ an $\text{Al}_2\text{O}_3(0001)$ / $\text{NiAl}(110)$ . . . . .	113
5.18	Energieverlustspektren, für Projektile, die kein (blau) bzw. ein (rot) Elektron ausgelöst haben . . . . .	115
5.19	Energieverlustspektren, für Projektile, die kein (blau) bzw. ein (rot) Elektron ausgelöst haben . . . . .	115
5.20	Energieverluste der verschiedener Peaks . . . . .	118
5.21	Differenzen der Energieverluste . . . . .	119
5.22	Energieverlust von $\text{He}^0$ an $\text{NiAl}$ und $\text{Al}_2\text{O}_3$ / $\text{NiAl}$ . . . . .	120
5.23	Elektronenausbeute an $\text{NiAl}$ und $\text{Al}_2\text{O}_3$ / $\text{NiAl}$ . . . . .	121
5.24	2-dim Darstellung von Energieverlust und Elektronenausbeute am unvollständig bedecktem Oxid . . . . .	123
5.25	Energieverlustspektren am unvollständig bedecktem Oxid . . .	124
5.26	Energieverlust bei der Streuung am unvollständig oxidiertem $\text{NiAl}(110)$ . . . . .	125
5.27	Energieverlustdifferenzen an der mit 250 L oxidierten $\text{NiAl}(110)$ - Oberfläche . . . . .	126
5.28	Elektronenausbeute 3 keV $\text{He}^0$ an der mit 250 L oxidierten $\text{NiAl}$ -Oberfläche . . . . .	127
5.29	Bestimmung des Verhältnisses der sauberen $\text{NiAl}$ zur oxidierten Oberfläche des $\text{NiAl}(110)$ -Kristalls . . . . .	128



# Selbstständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, David Blauth, dass ich diese Arbeit selbstständig erarbeitet und verfasst habe. Ich habe keine anderen als die angegebenen Hilfen und Hilfsmittel verwendet. Ich habe mich nicht anderwärts um einen Doktorgrad beworben und besitze keinen entsprechenden Doktorgrad. Ich habe Kenntnis von der dem angestrebten Verfahren zugrunde liegenden Promotionsordnung.

